昭和38年7月2日第3種郵便物認可
2014年11月1日発行　第52巻11号　毎月1回1日発行
ISSN 0386—2240

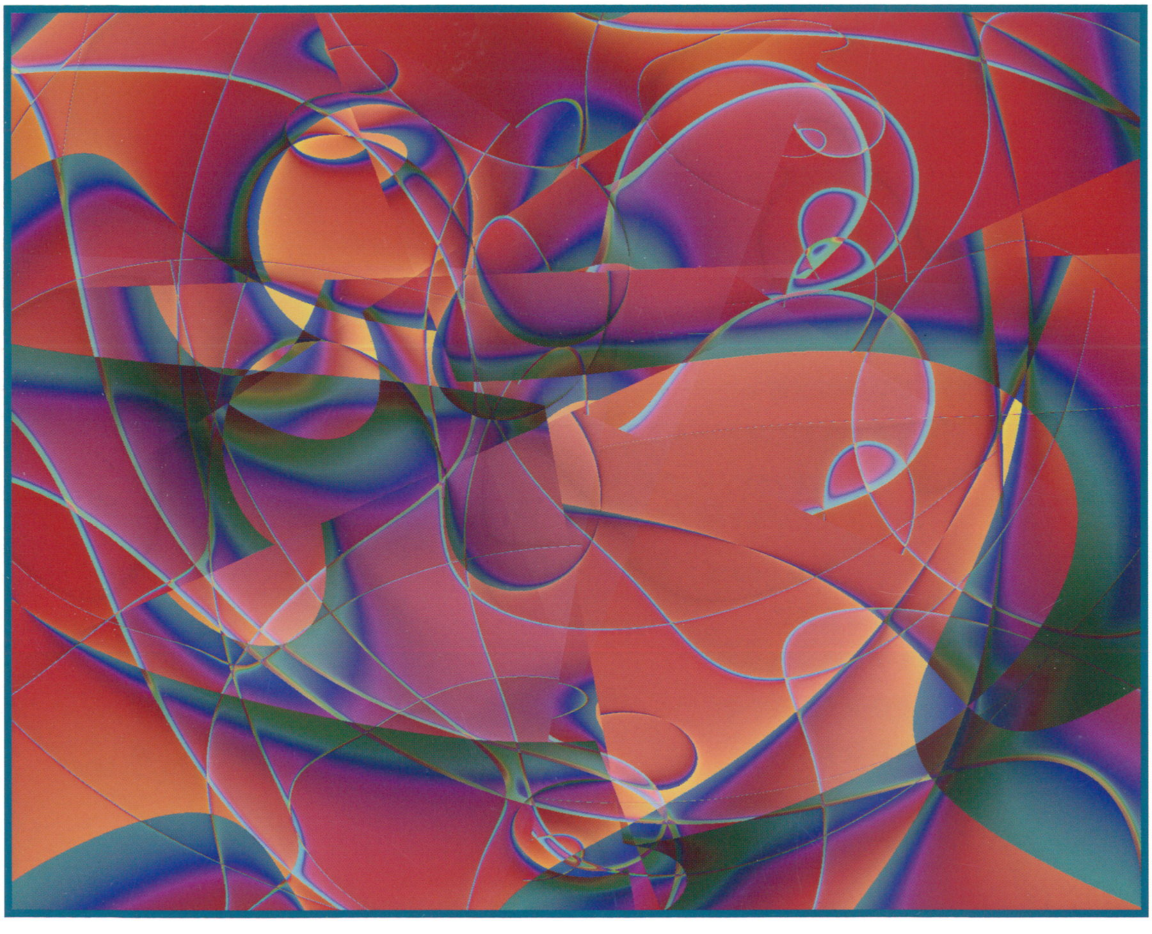
数理科学

11
2014

特集

応用するトポロジー

“柔らかい幾何学”がもたらす諸分野の発展



No.617
サイエンス社

臨時別冊・数理科学（SGC ライブラリ-112：for Senior & Graduate Courses）

重力とエントロピー

重力の熱力学的性質を理解するために

福間将文・酒谷雄峰　共著

定価 2750 円

重力の熱力学的性質を，エントロピー概念を軸にして，基礎から関連する話題も含めて解説．

MATHEMATICAL SCIENCES
Number 617 November 2014

応用するトポロジー

“柔らかい幾何学”がもたらす諸分野の発展

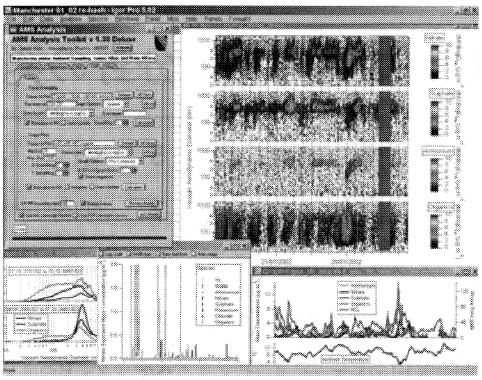
表紙：戸川　隼人

■広告企画■

科学技術計算・ビジュアリゼーションソフト最前線

グラフ作成・解析環境の統合ソフトウェア

IGOR Pro（イゴール・プロ）英語版／日本語版



IGOR Proは、グラフ作成、データ解析、プログラミングツールをひとつに統合した科学者やエンジニアのための拡張性の高いパワフルなツールです。
・出版品質のグラフィックを作成できます。EPS等、高解像度の画像形式で出力することもできます。
・テキスト、標準バイナリ、Excel、JCAMP、MatLabデータなど、幅広い種類の形式のデータファイルをインポートできます。
・任意の数のグラフやテーブルを任意の幅で複数同時に表示できます。また、10万ポイントを超える大規模なデータでも高速に処理できます。文字列データ、内部８形式の数値データ、および４次元までのデータに対応しています。
・グラフ機能においては、各曲線はそれぞれ独自の色、太さ、スタイルに設定できます。曲線上にある各ポイントの線の色、マーカーのサイズや形状は、他のデータの値を利用することもできます。グラフの中に表示できる曲線、軸、注釈、等高線、写真、画像の数に制限はありません。
・フーリエ、ウェーブレット、Hough変換。無制限の独立変数を伴う組み込み関数又はユーザー定義関数への線形/非線形回帰曲線、微分、積分、常微分方程式、重畳（コンボリューション）、ヒストグラム、スムージング、数学的表現による評価、多くのLAPACKルーチンを利用した行列演算、信号測定、疎データまたは行列データの等高線化、偽カラー表示、などの解析機能を持っています。
・動作環境：Windows/MacOSX

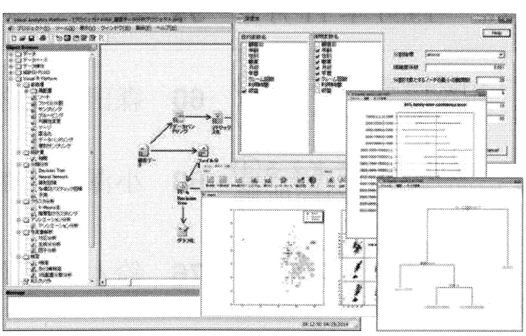
■問い合わせ先■

株式会社ヒューリンクス

〒103-0015 東京都中央区日本橋箱崎町5-14
TEL03-5642-8380　FAX03-5642-8381
E-mail:soft.sales@hulinks.co.jp
URL:http://www.hulinks.co.jp/

Rユーザ向け分析プラットフォーム

Visual R Platform



Visual R Platformは、世界中で利用されているR言語が持つ多くの統計手法を、簡単なマウス操作で実行できる統計解析ツールです。データの整理、加工、抽出からグラフ出力、統計解析まで機能毎に一アイコン化されており、アイコン同士を矢印でつなぐことで処理フローを作成し、分析の一連の流れを一目で把握することができます。調査研究機関や教育機関での導入実績がございます。
・Rの便利な新機能、最新の分析アルゴリズムが簡単に実行できます（基本演算、行列演算、線形代数、シミュレーション、多変量解析、回帰分析、分散分析、線形モデル、医薬生物統計、検定。時系列解析、ニューラルネット他）
・高品質で多種のグラフィックスを備え、Rが持つグラフ機能も使用でき、カスタマイズも自由自在です。
・作成した処理フローは、Rスクリプトへ一括変換でき、Linux上のRなど環境を問わず同内容の分析処理が実行できます。
・並列処理や要望に応じた機能追加（Rライブラリ、階層ベイズ、他機械学習）が使用できます。
・自身のRスクリプトを一アイコンとして処理フローに組み込み可能、プログラム資源を再利用できます。
・ODBCといったインターフェースを備え、他ソフトウェアとの連携動作可能な上、入出力も様々なアプリケーション、画像フォーマットに対応します。
・高度な機能と強力なサポート体制で、意思決定や業務効率化を力強く支援します。
『動作環境：Windows』

■問い合わせ先■

株式会社ＮＴＴデータ数理システム

〒160-0016 東京都新宿区信濃町35番地
信濃町煉瓦館１階
TEL03-3358-6681　FAX03-3358-1727
E-mail：vrp-info@msi.co.jp
URL：http://www.msi.co.jp/vrp/

November 2014 MATHEMATICAL SCIENCES Number 617

特集／応用するトポロジー

巻頭言

トポロジーを応用する研究の流れ

出口 哲生

トポロジー（topology）とは何を意味する言葉なのであろうか．一般的な用法としては，トポロジーとは曲線や曲面など幾何学的対象のつながり方や全体の様子に関して，対象や空間を連続的に変形しても一定となる性質を示す，と言えるであろう．例えば，結び目の曲線を切断しない連続的な3次元写像を用いて，三葉結び目（trefoil knot）を自明な結び目（trivial knot）に変形することはできない[1)]．三葉結び目と自明な結び目のトポロジーを区別することは，結び目理論[2,3)]の出発点となる（三葉結び目は下川氏の記事の図1を参照）．

トポロジーという言葉は数学でも必ずしも一つの意味では用いられず，開集合を定義する位相を意味する場合と，結び目などの低次元トポロジーを意味する場合の二通りがあるという（河内氏の記事）．ただし，どちらにしても連続性を取り扱うという意味では共通する．一方，トポロジーという言葉が出てくる論文が自然科学の様々な分野で最近，急に増えてきた．日本で国際会議も開催された[4)]．そこで本号では，その中で最も素朴なアプローチの一つと思われる低次元トポロジーの応用研究を中心にして，特集を組んだ．

空間グラフのトポロジーは，数学で現在活発に研究されているテーマの一つである（新國氏の記事）．一方，遺伝情報の担い手であるDNAのトポロジーに関する研究は，生物学において既に約半世紀にわたって続けられてきた（下川氏の記事）．化学の分野では，様々なトポロジーを持つ高分子の合成（手塚氏の記事）が最近になって初めて可能となり，特に直近10年間の進展は著しい．物理学では，ゲージ場の理論を記述する上でトポロジーは欠かせない言葉であり（伊藤氏の記事），超弦理論やトポロジー的場の理論では多様体のトポロジーを記述する新しい不変量が導かれた（藤氏の記事）．これらの新しいトポロジカル不変量は，数学にも大きな影響を与えている（河内氏の記事）．結び目を表す空間曲線を美しくきれいな形に描くことは容易でないが，結び目に対してある種のエネルギーを定義してその最小値を与える空間曲線を求めると，美しい曲線が導かれるのではないかと期待される．結び目に対してエネルギーを定義してみると，様々な数学と結びつくことが見出されている（今井氏の記事）．

実は，距離概念が登場するリーマン幾何学など微分幾何学に関しては，一般相対性理論や素粒子論のゲージ場の理論など，物理学の中で様々な応用が知られている[5)]．その一方，距離概念が登場しない低次元トポロジーが物理学さらには自然科学の諸分野で本格的に応用され始めたのは，案外最近のことなのである．ただし最初のきっかけは歴史的に古く，真空を満たす完全流体であるエーテル中の閉じた渦糸が原子を与えるのではないか，という興味深い仮説が19世紀後半にケルビンによって提案された[6)]．粘性（流体の内部摩擦）のな

い完全流体では渦度は保存され，一度閉じた渦が形成されるといつまでも壊れることはない（木村氏の記事）．もちろんケルビンの渦糸原子の仮説は実際には正しくなく，科学の本流の歴史には残っていない．しかし，大変魅力的な考え方であったため，この仮説に刺激され，テイトは結び目の分類を研究して結び目に関する様々な予想を導き[3]，リトルウッドは 10 交点までの素な結び目の表を作成した．これらの研究はその後，数学的な結び目理論の成立を促す強力な動機となった．

最近，物性物理学において，トポロジカル絶縁体やトポロジカル超伝導体など，系の状態がトポロジカル不変量を用いて表されるような物質の研究が盛んに行われている．特に，理論的に提案されたトポロジカル絶縁体が 3 次元物質で現実に作成された．トポロジカル絶縁体に関して本誌では 2 本の解説記事が掲載されている[7,8]．本特集では触れなかったが，現在世界的な大流行となっている．また，日本の研究が非常に大きく貢献している．ちなみに，トポロジカル絶縁体に関係するトポロジカル不変量であるゲージ場の特性類に関しては，伊藤氏の記事で解説されている．

低次元トポロジーが実験可能な対象の研究に応用されるようになったのは，先にも述べたように，比較的最近のことである．結び目は身近な存在ではあるが，しかし，応用研究上の難点がそれぞれの分野に存在していた．これらの困難が乗り越えられた結果，トポロジーの応用研究が自然科学の幅広い領域で展開されている．例えば，多数の分子が化学反応によって結合して導かれる高分子鎖は，たいてい両端を持つひものような線形鎖である．その両端を化学反応で結合し，環状に閉じた高分子鎖を導くことは，実験技術上非常に困難であった．しかし，最近の合成技術の進歩により，環状の高分子を合成することが可能となった．さらに，単なる環状鎖ではなく，グラフの形状で表されるような複雑な構造のトポロジーを持つ高分子が合成可能となった（手塚氏の記事）．グラフのトポロジーの本格的な分類は最近研究されており，複雑なものは無限に存在するが，しかし，現実に合成される高分子の物性を記述する都合上，現実的で有意義な分類研究が展開されることが期待される．ちなみに数学と他分野との連携研究の発展を促すプログラムの中で，グラフや結び目のトポロジーと合成高分子の連携研究の課題が採択されたことを付記しておきたい[9]．また流体分野では，特に電磁流体力学において，太陽フレアなどの磁力線の様子を記述する際にトポロジーの応用が重要であろうと予想されていた．しかし，流体力学としての本格的な理論展開は比較的最近行われている．粘性係数が非常に小さな流体において，完全流体における渦糸トポロジーの保存と同様な保存が見られるかどうか，という基本的な重要課題が認識されていることは興味深い（木村氏の記事）．

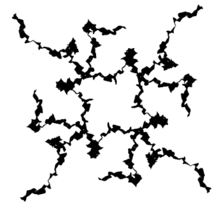
このように，トポロジーを応用することにより，自然科学の諸分野が今後もより豊かに発展していくことが予想され，さらなる展開が期待される．またそれにともなって，トポロジーという言葉の意味も次第に豊かになり，拡大していくに違いない．

参考文献

1) クゼ・コスニオフスキ著，加藤十吉編訳『トポロジー入門』（東京大学出版会）．
2) 河内明夫編著『結び目理論』（シュプリンガー・ジャパン）．
3) 村杉邦男著『結び目理論とその応用』（日本評論社）．
4) 国際会議「高分子の統計力学とトポロジーそして DNA やタンパク質の構造と機能への展開」(Statistical physics and topology of polymers with ramifications to structure and function of DNA and proteins: a Satellite Meeting of STATPHYS24) 2010 年 8 月 2 日～6 日，京都大学基礎物理学研究所．Proceedings: *Progress of Theoretical Physics Supplement* **191** (2011).
5) 中原幹夫著，佐久間一浩訳『理論物理学のための幾何学とトポロジー I』（ピアソン・エデュケーション）．
6) Lord Kelvin, On Vortex Atoms, *Phil. Mag.* Vol. **XXXIV** (1867) pp.15–24.
7) 古崎昭「トポロジカル物質の理論的発見」，数理科学 2013 年 11 月号，pp.20–25.
8) 安藤陽一「物性物理学と新規物質―超伝導体とトポロジカル絶縁体を例として」，数理科学 2013 年 11 月号，pp.26–31.
9) 基盤研究 (B)（特設分野研究）「結び目やグラフのトポロジーを応用した新高分子理論に基づく特性・機能創出」（平成 26 年度～30 年度，課題番号 26310206）．

（でぐち・てつお，お茶の水女子大学大学院人間文化創成科学研究科）

トポロジーと数学のいろいろな分野との関連



河内 明夫

1. 距離空間から位相空間へ

数学では，トポロジーという言葉は２つの意味で使われている．**位相空間**（topological space）の**位相**（topology）と**位相幾何学**（topology）のことである．この特集記事の空気を読めば，後者の意味でのトポロジーと数学の諸分野との関連について解説することだろうと思うが，これら２つの概念は**連続性**（continuity）を取り扱う学問という意味でつながっているので，前者の説明からはじめる．位相空間の位相は，抽象的に定義するのであるが，多くの場合には距離空間から導かれた位相空間を議論しており，また数学は（どの分野でも同じと思うが），より具体的イメージをもって理解することが応用上極めて有効であるので，ここでは距離空間により定まる位相空間について説明しよう．

$\mathbf{R}$ を実数全体の集合とする．空集合 ϕ と異なる集合 X について，つぎの条件をみたすような関数

$$d : X \times X \longrightarrow \mathbf{R}$$

が与えられているとき，関数 d を X の**距離関数**（metric function），集合 X と関数 d の組 (X, d) を**距離空間**（metric space），また値 $d(x, y)$ を X の元 x と y の**距離**（distance）という：

(1) $d(x, y) \geq 0$ がすべての元 $x, y \in X$ についてなりたち，$d(x, y) = 0$ となるのは $x = y$ のときであり，かつそのときに限る．

(2) $d(x, y) = d(y, x)$ がすべての元 $x, y \in X$ についてなりたつ．

(3) $d(x, y) + d(y, z) \geq d(y, z)$ がすべての元 $x, y, z \in X$ についてなりたつ．

例えば，実数全体の集合 $\mathbf{R}$ は２つの実数の差の絶対値

$$g(x, y) = |x - y| \quad (x, y \in \mathbf{R})$$

を距離関数として距離空間となる．

２つの距離空間 (X_i, d_i) $(i = 1, 2)$ が与えられたら，直積集合

$$X_1 \times X_2 = \{(x_1, x_2) | \, x_1 \in X_1, \, x_2 \in X_2\}$$

の２つの元 $x = (x_1, x_2)$, $y = (y_1, y_2)$ に対して

$$d(x, y) = d_1(x_1, y_1) + d_2(x_2, y_2)$$

とおくと，d は $X_1 \times X_2$ の距離関数となり，$(X_1 \times X_2, d)$ は距離空間となる．

こうして，実数全体の集合 $\mathbf{R}$ の n 個のコピーの積集合 $\mathbf{R}^n$ は，その元 $x = (x_1, x_2, \ldots, x_n)$ と $y = (y_1, y_2, \ldots, y_n)$ の距離を

$$g^P(x, y) = \sum_{i=1}^{n} |x_i - y_i|$$

で定めることにより距離空間となる．

距離空間 (X, d) が与えられると，任意の元

$x \in X$ を中心とする半径 $r > 0$ の開球体

$$U_r(x) = \{y \in X \,|\, d(x,y) < r\}$$

を定めることができる．このとき，X の部分集合 O で，各元 $x \in O$ について $U_r(x) \subset O$ となる半径 r が存在するようなものを**開集合**（open set）と定義する．空集合 ϕ も X 自体も開集合の仲間に入れることにして，すべての X の開集合の集まり $\mathcal{O}$ を**距離空間** (X,d) **により定まる位相**（topology defined by metric space），組 $(X,\mathcal{O})$ を**距離空間** (X,d) **により定まる位相空間**（topological space defined by metric space）という．一般の位相空間は，距離関数を経由せずに直接開集合の集まりを定義することにより定義される．開集合 O の補集合 $X \backslash O$ を**閉集合**（closed set）というが，開集合の集まりの代わりに閉集合の集まりで位相を定めることもできる．

$\boldsymbol{n}$ **次元ユークリッド空間**（Euclidean space）とは，**ユークリッド距離**（Euclidean metric）

$$g^E(x,y) = \sqrt{\sum_{i=1}^{n}(x_i - y_i)^2}$$

により定められた距離空間 $(\mathbf{R}^n, g^E)$ のことである．$n > 1$ のとき，ユークリッド空間 $(\mathbf{R}^n, g^E)$ は先ほどの距離空間 $(\mathbf{R}^n, g^P)$ とは異なっている．例えば，$\mathbf{R}^2$ において

$$g^P((1,0),(0,1)) = 2, \quad g^E((1,0),(0,1)) = \sqrt{2}$$

となる．しかしながら，g^P, g^E どちらの距離関数を使っても，開集合の集まり，すなわち位相 $\mathcal{O}$ は同じものになっており，同じ位相空間 $(\mathbf{R}^n, \mathcal{O})$ を定めることがわかる．位相空間は距離空間と密接に関連しているが，位相空間のほうが距離空間よりもリラックスした概念であることがわかる．

一般的にいえば，距離空間を対象に種々の議論を展開するのが**幾何学**（geometry）であり，位相空間に重きを置いて議論を展開するのが**位相幾何学**（topology）である．それらの研究において，さらに微分に重きをおいたものをそれぞれ**微分幾何学**（differential geometry），**微分位相幾何学**（differential topology）と呼ばれている．

距離空間 (X,d) が与えられると，X の空集合 ϕ と異なる任意の部分集合 X' もまた，距離関数 d の制限写像として定義された距離関数

$$d' : X' \times X' \longrightarrow \mathbf{R}$$

により距離空間となる．それにより定められる位相空間 $(X', \mathcal{O}')$ は位相空間 $(X, \mathcal{O})$ の**部分位相空間**（topological subspace）であるという．

例えば，整数全体の集合 $\mathbf{Z}$ は $\mathbf{R}$ の部分集合であるので，$(\mathbf{R}, g)$ の部分距離空間であり，位相空間でもある．しかし，この位相ではすべての整数はそれだけで開集合かつ閉集合となり，興味のある位相空間とはいえない．整数全体の集合 $\mathbf{Z}$ は，各素数 $p > 1$ により定まる興味深い距離空間であり，従って位相空間であることが知られているので，それを説明しよう．

$p > 1$ を素数として，0 でない整数 $n \in \mathbf{Z}$ を

$$n = p^r m \quad (r \geq 0 \text{ かつ } p \text{ と } m \text{ は互いに素})$$

と分解して $|n|_p = \dfrac{1}{p^r}$ と表し，関数

$$d_p : \mathbf{Z} \times \mathbf{Z} \longrightarrow \mathbf{R}$$

を

$$d_p(n_1, n_2) = \begin{cases} |n_1 - n_2|_p & (n_1 - n_2 \neq 0) \\ 0 & (n_1 - n_2 = 0) \end{cases}$$

のように定める．このとき，$(\mathbf{Z}, d_p)$ が距離空間となることは直ちに確かめることができよう．これにより位相空間 $(\mathbf{Z}, \mathcal{O}_p)$ が得られる．これは**数論**（number theory）の基礎に横たわる位相空間である．

2. 位相幾何学

位相空間 $(X, \mathcal{O}_X)$ と $(Y, \mathcal{O}_Y)$ が与えられているとする．写像 $f : X \to Y$ について，Y の各開集合 $O \in \mathcal{O}_Y$ の原像

$$f^{-1}(O) = \{x \in X \,|\, f(x) \in O\}$$

が X の開集合，すなわち $\mathcal{O}_X$ の元になるならば，その写像 f を**連続写像**（continuous map）という．

解析学（analysis）では，写像 $f:\mathbf{R}\to\mathbf{R}$ が連続であるとは，各 $x\in\mathbf{R}$ に対して

$$\lim_{h\to 0} f(x+h)=f(x)$$

であると学習するが，それは上で述べた写像 f が位相空間 $(\mathbf{R},\mathcal{O})$ の意味で連続であることと同値である．

写像 $f:X\to Y$ が全単射であり，かつ f とその逆写像 f^{-1} がともに連続であるとき，その写像 f を**同相写像**（homeomorphism）という．また，そのような同相写像 f が存在するとき，位相空間 $(X,\mathcal{O}_X)$ と $(Y,\mathcal{O}_Y)$ は**同相**（homeomorphic）であるという．

以後の話においては，断る必要がない限り距離関数 d や位相 $\mathcal{O}$ は省略して，距離空間 X，位相空間 X と呼ぶことにする．

位相幾何学のトポロジー研究とは「位置と形」を研究する学問である．**形**（topological shape）の研究とは，どのような位相空間があるか，また与えられた 2 つの位相空間が同じものになるかどうか（すなわち同相であるかどうか）を考えるような研究のことである．また**位置**（topological situation）の研究とは，位相空間 X とその部分位相空間 X' と X'' で，X' と X'' は同相であるようなものについて，組 (X,X') と (X,X'') はどのような条件を課せば同相になるかを考える研究のことである．

しかしながら，位相空間や位相空間の組は数えられないほどあり，何らかの意味で単純化した研究対象に絞って研究する必要がある．**多様体**（manifold）は形の研究についての典型的な研究対象であり，また**結び目理論**（knot theory）は位置の研究についての典型的な研究対象である．結び目理論については次節で説明することにして，この節の残りでは多様体のトポロジーと他の数学の学問分野の関連について考えてみる．

位相空間 X が **n 次元多様体**（n-dimensional manifold）であるとは，X の各点 x について，それを含むような開集合 $O(x)$ で，ユークリッド空間 $\mathbf{R}^n$ に同相であるようなものが存在することである．ふつうには**なめらかな**（smooth）n 次元多様体を考えるので，$O(x)$ としては x で接した**接空間**（tangent space）$T_x(X)$ を取ることができ，そのことから**リーマン多様体**（Riemannian manifold）や**ファイバーバンドル**（fiber bundle）という**大域的な微分幾何学**（global differential geometry）において標準的な概念が生まれる．さらに接空間 $T_x(X)$ の移動に伴い，一般線形群 $GL(n;R)$ などの**構造群**（structure group）の考え方が生じる．より一般的には，多様体上の**変換群**（transformation group）の考え方が生まれる．一般線形群は**リー群**（Lie group）の仲間であり，多様体の研究にはリー群の考え方が必要となり，またその微分として**リー代数**（Lie algebra）の研究とも関連する．1 次元多様体とはユークリッド空間 $\mathbf{R}$ や円周 S^1 のことである．2 次元多様体は**曲面**（surface）とも呼ばれており，球面 S^2，トーラス $T^2=S^1\times S^1$，射影平面 P^2，クラインの壺などが代表的なものである．

多様体のトポロジー研究では，多様体を位相的に区別するのに役立つような道具，すなわち**位相不変量**（topological invariant）が重要である．よく知られた位相不変量として，多様体 X 内の点 x を基点とする**基本群**（fundamental group）$\pi_1(X,x)$ や**ホモトピー群**（homotopy group）$\pi_q(X,x)$，**ホモロジー群**（homology group）$H_*(X)$ や**コホモロジー群**（cohomology group）$H^*(X)$ がある．基本群 $\pi_1(X,x)$ の各部分群 G に対して，基本群 $\pi_1(\tilde{X},\tilde{x})=G$ となるような (X,x) 上の**被覆空間**（covering space）$(\tilde{X},\tilde{x})$ の理論が展開される．これはファイバーバンドルの特別な形とみることもできる．

基本群 $\pi_1(X,x)$ の研究は，有限表示群の同型問題などを直接取り扱う**組み合わせ群論**（combinatorial group theory）の研究と深く関連して研究されている．

多様体のホモロジーやコホモロジーについては**ポアンカレの双対性**（Poincaré duality）が基本

的であり，それにより定義される**交叉形式**（intersection form）は次元的制約をうまく表現している．ホモロジーやコホモロジーの元として定義される多様体の**特性類**（characteristic class）は多様体の幾何全般を通しての道具となっており，**数理物理**（mathematical physics）においてもまた有用な概念である．

多様体のホモロジー論から離れたホモロジー群の研究としては，**群のホモロジー**（homology of group）や**環のホモロジー**（homology of ring）など純代数の**群論**，**環論**の研究としても，永らく研究がなされてきた．

高次元多様体のトポロジー研究では，**モース理論**（Morse theory）と関連した**手術理論**（surgery theory）が重要で，上記位相不変量を道具として研究されてきた．S^1 の n 個のコピーの直積である **n 次元トーラス**（n-dimensional torus）T^n がリー群として作用するような多様体を研究する**トーリック多様体**（toric manifold）の理論は**代数幾何学**（algebraic geometry）の研究に端を発しているが，位相的にも興味深い研究であり，現在活発に研究されている．

3 次元多様体（3-dimensional manifold）や **4 次元多様体**（4-dimensional manifold）の研究が，今日多様体のトポロジー研究の中でも特に活発に研究されている．われわれの住む世界が縦・横・高さのある 3 次元空間と密接に関連しており，またそれに時間を考慮した 4 次元空間とも密接に関連していることから，多くの研究が可視化の対象となっており，数多くの興味深い研究がなされてきたのである．

4 次元多様体のトポロジー研究では，数理物理学の**ゲージ理論**（gauge theory）や**サイバーグ・ヴィッテン理論**（Seiberg–Witten theory）を駆使して，**エキゾチック多様体**（exotic manifold）の対の構成研究が盛んになされている．ここで，エキゾチック多様体対とは，X と Y は同相ではあるが，なめらかな同相写像 $f: X \to Y$ は存在しないような多様体の対 (X, Y) のことである．とくに，4 次元球面 S^4 を X にとるときのエキゾチック多様体対 (X, Y) が存在するかどうかという問題は，4 次元の**なめらかなポアンカレ予想**（smooth Poincaré conjecture）と呼ばれて，4 次元トポロジーの未解決の重要問題になっている．2 つの任意に与えられた 4 次元以上の多様体が同相かどうかを決定するアルゴリズムは存在しないことが知られており，4 次元多様体の同相問題を考える上では何らかの意味で限定した 4 次元多様体のクラスに限定して同相問題を考える必要がある．曲面上の曲面バンドルの一般化である**レフシェッツ多様体**（Lefschetz manifold）は，そのような 4 次元多様体の興味深いクラスを形成しており，より一般の**シンプレクティック多様体**（symplectic manifold）とともに研究されている．この研究はまた**曲面の写像類群**（mapping class group of surface）の研究とも関連がある．

3 次元多様体のトポロジー研究では，G. ペレルマンによる **3 次元ポアンカレ予想**（3-dimensional Poincaré conjecture）の解決は有名である．その証明法は**リッチ・フロー**（Ricci flow）の理論という偏微分方程式を用いるものである．この解決は，すべての閉じた 3 次元多様体は 8 つの幾何構造をもつ 3 次元部分多様体に分解するだろう，という**サーストンの予想**（Thurston conjecture）の重要部分の解決になる．サーストンの予想の本質は双曲幾何の構造を有する多様体，すなわち**双曲多様体**（hyperbolic manifold）であるか，曲面上の S^1 バンドルの一般化である**ザイフェルト多様体**（Seifert manifold）であるだろう，という予想である．ザイフェルト多様体は 4 次元のレフシェッツ多様体のファイバー曲面を S^1 に置き換えた多様体といえるが，その位相的分類はよく知られている．3 次元双曲多様体の基本群は**射影的特殊線形群**の離散的部分群になる．ここで射影的特殊線形群というのは，$ad - bc = 1$ となるような複素数 $a, b, c, d \in \mathbf{C}$ を成分とする行列 $\begin{pmatrix} a & b \\ c & d \end{pmatrix}$ 全体のなす特殊線形群 $SL(2, \mathbf{C})$ を 2 次の単位行列 E の ± 1 倍のなす正規部分群 $\{\pm E\}$ で割って得られる群 $PSL(2, \mathbf{C})$ のことである．3 次元双曲

多様体の基本群はこの観点から**クライン群**の研究と関連して研究がなされている．

トーラス $T^2 = S^1 \times S^1$ の n (≥ 2) 個以上のコピーの連結和であるような曲面，すなわち**種数 n の曲面**は，リーマン面として，複素構造全体のなす**タイヒミュラー空間論**や**関数論**，**複素解析学**の基礎概念として研究されている．

3 次元多様体の基本群は重要な位相不変量であるが，一般的には計算が困難である．3 次元多様体特有の**組み合せトポロジー**（combinatorial topology）と呼ばれるテクニックを使う組み合せ群論の格好の題材である．

3 次元多様体の**ヘゴード分解**（Heegaard splitting）の研究も曲面の**曲線複体**（curve complex）の研究などを利用して発展している．数理物理学と関連する 3 次元多様体の位相不変量として，**ヘゴード・フロアホモロジー**（Heegaard Floer homology），またヴィッテン不変量などの**量子不変量**（quantum invariant）があるが，次節で説明する結び目理論と密接に関連することで原理的には計算可能な位相不変量として，活発に研究されている．

3. 結び目理論

円周 S^1 が 3 次元空間 $\mathbf{R}^3$ あるいは 3 次元球面 S^3 に埋め込まれたものを**結び目**（knot）という．また，いくつかの交わらない結び目の集まりを**絡み目**（link）という．結び目理論の主要な研究目的はつぎの 2 つの問題を考えることである．

(1) どのような結び目や絡み目があるか．

(2) 2 つの結び目あるいは絡み目 K, K' が与えられているとき，向きを保存している同相写像 $h : \mathbf{R}^3 \to \mathbf{R}^3$ で $h(K) = K'$ となるようなものが存在するかどうか．

結び目理論の研究の優れた特徴は，位置研究としての研究対象をはっきり目で確認でき，また適用した数学理論の有効性も直接確認できるところにある．向きづけられた閉じた 3 次元多様体は直接目で見ることはできないが，結び目や絡み目の**デーン手術理論**（Dehn surgery theory）を通して具体的に認知できる．具体的に，結び目理論が他の数学とどのように関わっているかを述べてみよう．結び目や絡み目を一般化した空間グラフの研究はもちろん**グラフ理論**（graph theory）と関係する．結び目や絡み目の標準的な例としてよく登場する**トーラス結び目・絡み目**（torus knot/link）はデーン手術によりザイフェルト多様体となり，3 次元多様体として重要な例になる．一方，トーラス結び目・絡み目の結び目解消数は**複素曲線の特異点**（singularity of complex curve）の研究と関係している．また，**2 橋結び目・絡み目**（2-bridge knot/link）は **3 次元双曲幾何**（3-dimensional hyperbolic geometry）を具体的に論ずる際にはなくてはならない標準的な例である．双曲的結び目・絡み目の**双曲体積**（hyperbolic volume）は，位相不変量であるが，その値は**リーマンのゼータ関数**（Riemann's zeta function）の特殊値と関係があることも知られている．交点数が少ない図式で表される場合には，コンピュータによってその近似値が計算され，インターネットで公開されている．**プレッツェル結び目・絡み目**（pretzel knot/link）は 3 次元双曲幾何のみならず平面幾何の**折り返し群**（refelection group）や**フックス群**（Fuchsian group）とも関係している．

結び目や絡み目を区別する多項式型位相不変量として，**ジョーンズ多項式**（Jones polynomial）や**アレクサンダー多項式**（Alexander polynomial）が知られている．これらは，数理物理の**量子場の理論**（quantum field theory），とくに**ヤン・バクスター方程式**（Yang–Baxter equation）と関連がある．これらの多項式は，それぞれホモロジー理論へ一般化され，前者は**ホバノフ・ホモロジー**（Khovanov homology），後者は**ノットフレアホモロジー**（knot Floer homology）と呼ばれているが，**表現論**（representation theory）や **3 + 1 次元共形場理論**（conformal field theory）の立場からの研究もある．アレクサンダー多項式は 90 年近く前に開発された位相不変量で，これまでには，結

び目や絡み目の基本群 $\pi_1(\mathbf{R}^3\backslash K, x)$ に伴う**群論**（group theory）の研究，特に他の群への表現の研究やそれに関連した**アレクサンダー加群**（Alexander module）などの**可換環論**（commutative ring theory）の研究など，多くの基礎的研究がなされてきた．結び目理論には，他の位相不変量として，結び目や絡み目の**2次形式**（quadratic form）や**符号数不変量**（signature invariant）のような数論的な位相不変量もある．

関数論の**リーマン面**は球面 S^2 上の**分岐被覆**（branched covering）と関連するが，結び目や絡み目上で分岐する3次元球面 S^3 の分岐被覆も詳しく研究されてきた．

結び目群や絡み目群より強力な**カンドル理論**（quandle theory）も結び目や絡み目の図式移動と相性がよく，近年注目されて，研究されている．結び目や絡み目の集合は**組みひも**（braid）の全体集合をマルコス同値と呼ばれる関係で割ったものと同一視できるという**アレクサンダー・マルコフの定理**（Alexander–Markov theorem）があり，その意味からも結び目理論は代数幾何や数理物理など組みひも群の研究と関連する学問すべてとつながりがあるといってもよい．

4次元空間 $\mathbf{R}^4$ 内の**閉曲面結び目**（surface-knot）の理論については，**動画法**（motion picture method）と呼ばれる結び目や絡み目の変形理論を用いて研究がなされているが，これはモース理論の初歩理論でもある．組みひもを次元的に引き上げた**2次元組みひも**（2-dimensional braid）の概念も開発され，研究されている．

4. 付言

この解説記事では，参考書・参考文献は挙げませんでした．というのも，参考にすべきものは多岐にわたり，数冊を挙げて事足りるとするには無理があるからです．強いて挙げるとすれば『岩波数学辞典 第4版』（日本数学会編，岩波書店 (2007)）でしょうか．英語のキーワードを付しましたので，日本語・英語のキーワードでホームページを検索して調べていけば，知りたい情報にたどり着けるでしょう．学部学生や大学院学生の場合には，関心がある数学概念については指導教員に聞いて調べるのがよいです．他の方法としては，関心のあるテーマの「公開の数学の研究集会」（開催情報はホームページなどで調べればわかります）に出席して，情報を入手する方法もあります．

この拙文を読んで下さった研究者を目指す皆さんは，トポロジーを学習するには，こんなに多くの概念を勉強しなければならないのかと焦ってしまうかもしれませんが，そんなことはありません．数学のある専門分野を研究するとは，その数学の専門分野の具体的イメージを身に刻みつけるように獲得する行為です．どのような数学分野であれ，その研究を推し進める中で出会った新しい概念を，すぐに役立つかどうかはあまり意識せずに，数学的なイメージを持ちつつ1つずつ積み上げて学んでいくようにすれば，少し時間がかかるにしても，いろいろな数学を，具体的なイメージを持って獲得できるようになるはずです．いいかえると，新しい数学概念と出会ったときには必ず学習すると習慣づけておくならば，自分の関心を持って研究している専門分野だけを，落ち着いて，思う存分楽しみつつ，深く学んでいけばよいのではないか，と個人的には思っています．とはいっても，学部学生の場合，将来研究の進展の速度をぐっと遅くしないために，大学で習う程度の数学はできるだけ常識として身につけておくことが望ましいでしょう．数学には実験科学のような実験はないのですが，論文に書かれていないような情報や考え方を知ったり，自分の考え方を修正したりするために，人（研究者）に会う「思考実験」は行われております．これは自分の考え方の限界を乗り越えるために数学では必要なことと思われますので，人に会うのが苦手な人は，それを克服する努力をしたほうがよいと思います．この記事を読んで下さった皆様のトポロジーに関する‘はるかなる航海と冒険’に期待します．

（かわうち・あきお，大阪市立大学名誉教授）

空間グラフのトポロジー



新國　亮

1. はじめに

空間グラフ理論とは，3次元空間内において，幾つかの点を紐で繋いでできる図形を数学的に研究する分野である．対象が**結び目**の直接の拡張であることから，主に低次元トポロジー，結び目理論の立場から研究される．もともとは3次元空間内の閉曲面の研究をきっかけとして研究が始まったが，空間グラフが結び目の性質の一般化に留まらない内在的な研究課題を持つことが認識され，また高分子化学への応用上の観点から理論整備が要請されたことも相まって，特に1980年代以降，多くの重要な仕事がなされてきた．本稿では，それらすべての研究を網羅することはできないが，特に研究の動機付けとなる幾つかの代表的な現象を通して，空間グラフのトポロジーの研究の一端を紹介する．

2. 空間グラフ

グラフとは，集合 V，E，および**接続関数**と呼ばれる E から V の元の非順序対の集合への写像 ψ からなる3対 $G=(V,E,\psi)$ のことをいう．本稿では V，E はともに空でない有限集合と仮定する．V の元を G の**頂点**，E の元を G の**辺**という．$\psi(e)=(u,v)$ のとき，u と v をそれぞれ辺 e の**端点**といい，特に $u=v$ のとき，e を**ループ**と呼ぶ．頂点 v に対し，v を端点に持つループでない辺の本数と，v を端点に持つループの本数 $\times 2$ の和を v の**次数**という．図1(1)は

$$
\begin{aligned}
&V=\{v_1,v_2,v_3\},\\
&E=\{e_1,e_2,e_3,e_4,e_5\},\\
&\psi(e_1)=(v_1,v_1),\quad \psi(e_2)=(v_2,v_1),\\
&\psi(e_3)=(v_1,v_3),\quad \psi(e_4)=(v_3,v_2),\\
&\psi(e_5)=(v_3,v_2)
\end{aligned}
$$

で定義されたグラフ G を図解したものである．このとき頂点の次数は，この頂点から局所的に伸びている辺弧の本数として理解できる．グラフ $G'=(V',E',\psi')$ が G の**部分グラフ**であるとは，V'，E' がそれぞれ V，E の部分集合で，かつ ψ' が ψ の E への制限となっているときをいう（例えば図1(2)の太線部分）．

グラフ G は，各辺 e を線分と考え，接続関数に沿って各頂点に接着することで，自然にコンパクトな位相空間とみなせる．このとき，G の部分グラフは G の部分位相空間である．そこで G の3

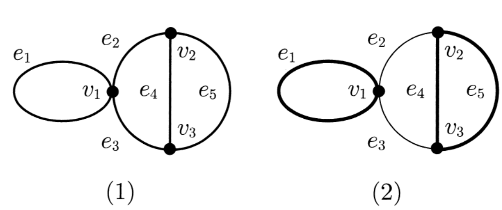


図1　(1) グラフ $G=(V,E,\psi)$，(2) G の部分グラフ G'．

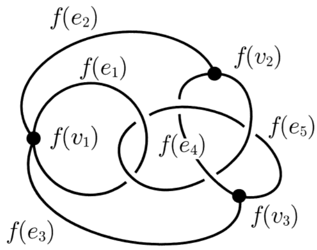


図 2　空間グラフ．

次元 Euclid 空間 $\mathbb{R}^3$ への埋め込み[*1)] $f: G \to \mathbb{R}^3$ を G の**空間埋め込み**といい，その像 $f(G)$ を**空間グラフ**という．特に G 自身が円周（の m 個の非交和）と同相であれば，$f(G)$ は**結び目**（**m 成分絡み目**）にほかならない．一般には，$f(G)$ は G のある部分グラフ G' の像 $f(G')$ として結び目（絡み目）を含む．これを空間グラフの**結び目（絡み目）成分**という．例えば，図 2 は図 1 のグラフ G のある空間埋め込み f の像で，図 1 (2) の部分グラフ G' の f による像は 2 成分絡み目である．

結び目や絡み目の場合と同様に，$\mathbb{R}^3$ の全同位で移り合う 2 つの空間グラフ $f(G)$ と $g(G)$ は，互いに**同型**であるという．正確には，単位閉区間を $I=[0,1]$ として，ある同相写像 $H: \mathbb{R}^3 \times I \to \mathbb{R}^3 \times I$ が存在して，

(1)　$\mathbb{R}^3$ の自己同相写像の族 $\{h_t \mid t \in I\}$ が存在して，$x \in \mathbb{R}^3$ に対し $H(x,t)=(h_t(x),t)$,

(2)　h_0 は $\mathbb{R}^3$ の恒等写像,

(3)　$h_1(f(G)) = g(G)$

が成り立つときをいい，このとき $f(G) \cong g(G)$ で表す．例えば，図 3 の空間グラフ $f(G)$ と $g(G)$ は互いに同型である．結び目の場合と同様の「あやとり変形」の他，頂点の周りの辺をぐるぐる捻る変形も許されるのが大きな特徴である．さらに，グラフ G は $\mathbb{R}^2$ への埋め込みが存在するとき**平面的**であるといい，$\mathbb{R}^3$ 内の平面内に全同位で移動できる空間グラフは**自明である**という[*2)]．これは自明な結び目（絡み目）の一般化である．自明でない空間グラフは**非自明である**という．例えば図 4 の $f(G)$ は自明な空間グラフである．一方，図 2 の空間グラフは，結び目成分 $f(e_4 \cup e_5)$ が非自明な結び目であることから，非自明な空間グラフである．

*1)　G と $f(G)$ が同相．G がコンパクトで $\mathbb{R}^3$ が Hausdorff 空間であるから，この場合は単射連続写像のこと．

*2)　よく知られているように，平面的でないグラフが存在するので（例えば図 7 の K_5），すべてのグラフが自明な空間グラフを持つわけではない．

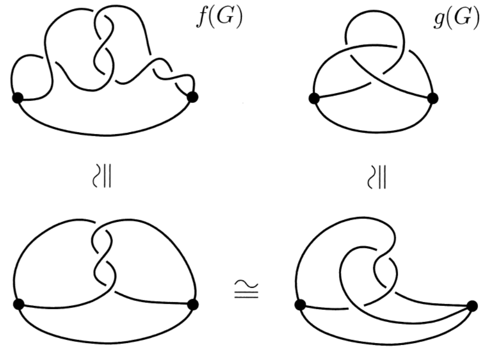


図 3　互いに同型な空間グラフ．

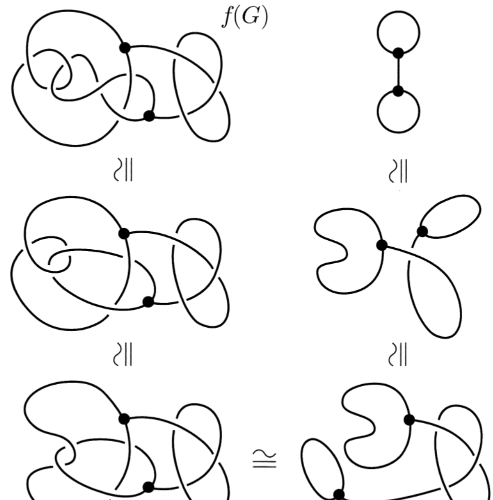


図 4　自明な空間グラフ．

3. 空間グラフの分類

結び目の完全分類，即ち結び目の同型類の完全なリストアップが結び目理論の目標であるように，グラフ G について，その空間埋め込みの像の同型類を完全にリストアップすることは，空間グラフ理論の大きな目標である．同型であることを示すには，図 3 のように実際に変形してみせれば良いが，同型でないことを示すには，**不変量**の研究が重

要である．いま，空間グラフ全体の集合から，ある集合への写像 φ で，$f(G)$ と $g(G)$ が同型ならば $\varphi(f(G)) = \varphi(g(G))$ となるようなものを**空間グラフの不変量**という．与えられた不変量において，異なる不変量値を持つ 2 つの空間グラフは互いに同型でない．不変量を調べるために，結び目の場合と同様に，空間グラフの絵を平面上にうまく描き，それを組合せ的に研究することが一般的に行われる．いま，空間グラフの平面上の**図式**とは，平面上に描かれた空間グラフの「絵」で，辺の交差が  で表されたものをいい，これら各交差を，この図式の**交差点**という．本稿で登場する空間グラフの「絵」は，すべて図式の例である．このとき，結び目に関するいわゆる **Reidemeister の定理**の拡張として，以下の定理が成り立つ．

定理 3.1　2 つの空間グラフが同型であるための必要十分条件は，それらの図式が，図 5 の I, II, III, IV, V の変形を有限回用いて互いに移り合うことである．

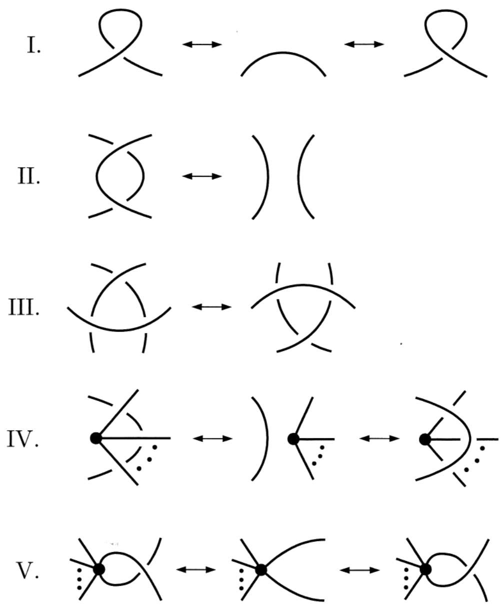
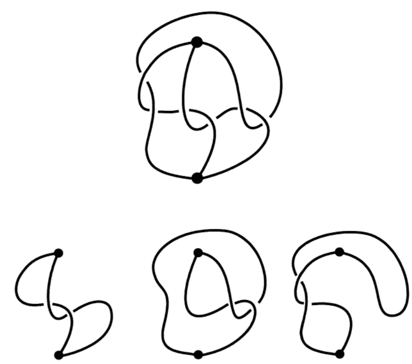


図 5　一般化された Reidemeister 変形．


図 6　樹下の θ 曲線．

特に I, II, III は結び目（絡み目）の **Reidemeister 変形**として良く知られている．新たに加わっている IV, V も Reidemeister 変形と呼ぶ．定理 5 から，空間グラフの不変量を得るには，これら 5 種類の Reidemeister 変形で不変であるような量を探せばよい．例えば，空間グラフの結び目（絡み目）成分の同型類の集合は，空間グラフの最も素朴な不変量である．しかし，例えば図 6 の**樹下の θ 曲線**と呼ばれる空間グラフは，結び目成分がすべて自明であるにも関わらず，空間グラフとして非自明であることが知られている．即ち，空間グラフを分類するには，その結び目（絡み目）成分を調べるだけでは不十分であることがわかる*3)．そこで，より強力な空間グラフの不変量の研究が必要となる．

空間グラフの代表的かつ強力な不変量として，空間グラフ $f(G)$ の $\mathbb{R}^3$ における補空間の**基本群** $\pi_1\left(\mathbb{R}^3 - f(G)\right)$ があり（**空間グラフの群**），空間グラフの図式から，有限個の生成元と関係子からなる群の表示を読みとることができる．特に結び目については**結び目群**と呼ばれ，この群が無限巡回群となることが自明な結び目を特徴付けるのは良く知られている．一方，空間グラフについては，次の **Scharlemann–Thompson の定理**が成り立つ[13]．

定理 3.2　平面的グラフの空間埋め込み f に対し，空間グラフ $f(G)$ が自明であるための必要十分条件は，G の任意の部分グラフ G' に対し，

*3)　一般に，次数 1 以下の頂点を持たない任意のグラフ G の空間埋め込み f に対し，G のすべての真部分グラフ G' において $f(G')$ と $g(G')$ は同型であるが，$f(G)$ と $g(G)$ は同型でないような G の空間埋め込み g が無限個存在することが知られている[4]．

$\pi_1\left(\mathbb{R}^3 - f\left(G'\right)\right)$ が自由群[*4]となることである．

一般に，空間グラフの群の表示だけを見て，それが自由群でないことを判定するのは簡単でない．そこで，さらにこの群の **Alexander 不変量**（Alexander イデアル，Alexander 多項式）を引き出して判定することが行われる[6]．樹下の θ 曲線が非自明であることは，例えばこの手法で示される．非自明性の判定だけでなく，2 つの空間グラフの非同型の判定にも有効である．

また，多項式型の有名な不変量として，**山田多項式**が知られている[17]．これは，結び目の図式の **Kauffman 括弧式**を基に定義された，変数 A についての整係数 Laurent 多項式で，やはり空間グラフの図式から計算できる．特に G の各頂点の次数が 3 以下の場合に，$-A$ の冪乗倍を除いて図式に依らない空間グラフの不変量となり，これも強力な不変量であることが知られている．いま，空間グラフ $f(G)$ を $\mathbb{R}^3$ の自己同相写像 $\Phi(x_1, x_2, x_3) = (x_1, x_2, -x_3)$ で写した像を $f(G)$ の**鏡像**という[*5]．空間グラフの群はもとの空間グラフとその鏡像を区別しないが，山田多項式を用いると，例えば樹下の θ 曲線とその鏡像が同型でないことがわかる．他にも，すべての空間グラフに定義できる多項式不変量として，**横田多項式**が知られている[18]．

結び目の場合と同様に，すべての図式の交差点数の最小値として，空間グラフの**最小交差数**が定義される．これも（決定は一般に難しいが）基本的な不変量である．比較的低い最小交差数を持つ結び目・絡み目の同型類の表はよく知られているが，空間グラフについても，例えば図 3，図 4 のグラフ G について，その空間埋め込みの像の同型類の表が作成されている[8,9]．

一方，同型の定義を緩めた分類の理論も盛んに研究されている．例えば，結び目理論において**同境**，**同位**，**I 同値**，**絡み目ホモトピー**，**絡み目ホモロジー**等による類別が考えられ，それぞれについて多くの研究が成されているのに対し，空間グラフについても 1990 年代に谷山により同様の各種類別基準が導入され[16]，大域的研究の枠組みが整備され理論が大きく発展した．同時期に結び目の **Vassiliev 不変量**（**有限型不変量**）の概念も空間グラフに拡張されている．また，$\mathbb{R}^3$ 内の，境界付きコンパクト 3 次元多様体（ハンドル体）の全同位による類別と等価である，空間グラフの**近傍同値**の理論[15]は，2000 年代後半に組合せ的手法により再構成され，**カンドル**と呼ばれる代数系に基づいた不変量の導入など，再び精力的に研究されるようになった[3]．

■ 4. 絡み目内在性，結び目内在性 ■

先に述べた通り，平面的でないグラフの空間埋め込みの像は $\mathbb{R}^3$ 内の平面に決して含まれないため，空間グラフの自明性が定義されない．そればかりか，任意の空間埋め込みの像がさらに強い不可避な性質を有することがある．いま，任意の異なる 2 頂点をちょうど 1 本の辺で結んでできるグラフを**完全グラフ**といい，頂点数 n のものを K_n で表す（図 7）．このとき，Conway と Gordon は次を示した[1]．

定理 4.1

(1) K_6 の任意の空間埋め込み f に対し，$f(K_6)$ のすべての 2 成分の絡み目成分の**絡み数**の総和は奇数である．

(2) K_7 の任意の空間埋め込み f に対し，$f(K_7)$ の結び目成分で，7 つの頂点を含むもののすべての **Arf 不変量**の総和は奇数である．

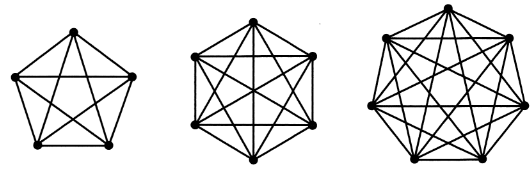


図 7　完全グラフ K_n（左から $n = 5, 6, 7$）．

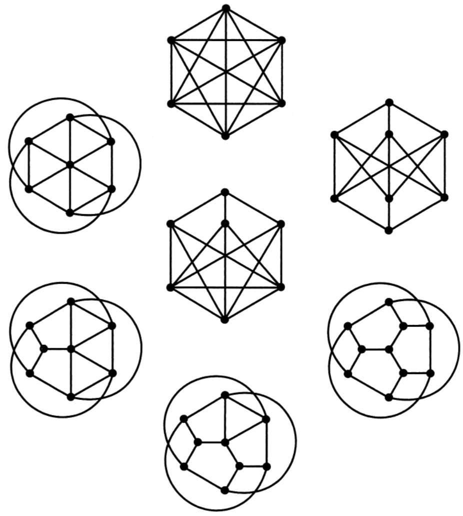
*4)　関係子のない表示を持つ群．ただ 1 つの生成元からなる自由群は無限巡回群である．

*5)　空間グラフの図式のすべての交差点の上下を逆転して得られる図式が表す空間グラフと定義しても良い．

ここで絡み数およびArf不変量とは，それぞれ2成分絡み目および結び目の図式から計算可能な，ある特定の不変量である．定理4.1から，一般に空間グラフの各結び目・絡み目成分たちの振舞いは独立でなく，不変量のレベルで互いに干渉し合っていることがわかる．定理4.1は関係式としては2を法とした弱いものであるが，分離絡み目*6)の絡み数，自明な結び目のArf不変量がともに0であることから，**Conway–Gordonの定理**と呼ばれる次の重要な事実を導く．

定理4.2
(1) K_6 の任意の空間埋め込み f に対し，$f(K_6)$ は非分離な2成分絡み目を含む．
(2) K_7 の任意の空間埋め込み f に対し，$f(K_7)$ は非自明な結び目を含む．

即ち，$\mathbb{R}^3$ にどのように埋め込んでも，「外せない」絡み目を必ず含むグラフや，「ほどけない」結び目を必ず含むグラフが存在する．前者の性質を**絡み目内在性**といい，後者の性質を**結び目内在性**という．これらの性質を持つグラフの特徴付けが次の問題となるが，そこでは以下のように，離散数学におけるグラフマイナー理論が用いられる．いま，グラフ H がグラフ G の**マイナー**であるとは，H が G から「部分グラフを取る」，「ループでない辺を縮約する」の2つの操作を有限回施して得られるときをいう．$\mathcal{P}$ をグラフのある性質とし，条件「$\mathcal{P}$ を持たないグラフの任意のマイナーも，やはり $\mathcal{P}$ を持たない」をみたすとする．これを $\mathcal{P}$ **はマイナーに関して閉じている**といい，例えば結び目内在性，絡み目内在性は，いずれもマイナーに関して閉じている．グラフ G において，G 自身は $\mathcal{P}$ を持つが，G の任意の真マイナーは $\mathcal{P}$ を持たないとき，G は $\mathcal{P}$ に関して**マイナーミニマル**であるという．グラフマイナー理論から，マイナーミニマルなグラフは有限個しかない．このとき，$\mathcal{P}$ を持つグラフは，$\mathcal{P}$ に関してマイナーミニマルなグラフをマイナーに持つという形で特徴付けられる．図8の K_6 を含む7個のグラフ（**Petersen族**と呼ばれる）は絡み目内在性に関してマイナーミニマルであることが1980年代中盤には既に知られていたが[12]，これら7個ですべてであることが，Robertson, Seymour, Thomasらによって1995年に示された[11]．証明には，2編の「準備の論文」を含む全3編の論文を要し，費やされた紙数はちょうど100頁に及ぶ．


図8　Petersen族．

一方，結び目内在性に関してマイナーミニマルなグラフは，K_7 をはじめとして，1990年代に14個，2000年代にはさらに27個発見されていたが，2010年代に入り，計算機の援用によって新たに222個が発見される展開となっており*7)，いまだ完全決定への道筋はついていない．一方，自然数 $m \geq 3$ を1つ固定するとき，その任意の空間埋め込みの像が非分離な m 成分絡み目を含むようなグラフが存在することも示されている（**m 成分絡み目内在性**）．さらに，例えば図9の上段のグラフ G は結び目内在でも3成分絡み目内在でもないが，その任意の空間埋め込みの像は，非自明な

*6)「外せる」2成分絡み目．正確には，2成分絡み目 L が分離しているとは，$\mathbb{R}^3$ のある3次元球体で，L の一部の成分を含み，残りの成分とは共通部分を持たないものが存在するときをいう．「外せない」とき，**非分離である**という．

*7) 2010年8月に東京で開催された空間グラフ理論第2回国際ワークショップにおけるNaimiの講演でこの報告を聞いたとき，一瞬何が起きたのかわからなかった．

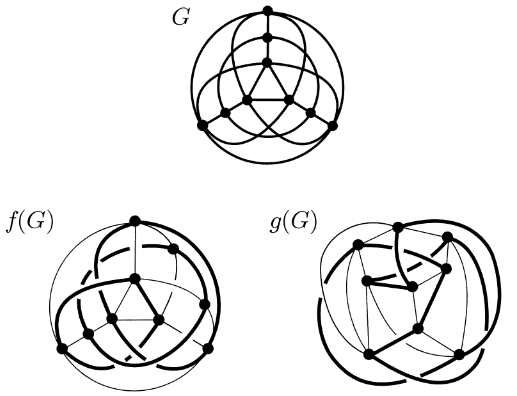


図 9　非自明な結び目か，またはどの 2 成分部分絡み目も非分離であるような 3 成分絡み目を必ず含む．

結び目か，または「どの 2 成分部分絡み目も非分離であるような 3 成分絡み目」を必ず含むことが知られている．実際，図 9 の下段の空間埋め込みの像 $f(G)$ は自明な結び目を含まないが，太線の部分にどの 2 成分部分絡み目も非分離であるような 3 成分絡み目を含み，また $g(G)$ は非分離な 3 成分絡み目を含まないが，太線の部分に非自明な結び目を含む．この例が示すように，グラフの結び目・絡み目に関する内在性は謎が多く，その全容はまだ深い霧で覆われているといって良いかもしれない．

■　5. 空間グラフと高分子化学　■

空間グラフの研究は，高分子化学への応用を持つ．むしろ，化学的根拠から予想された結果を数学的に立証することを積み重ねて空間グラフの研究が進展してきた経緯がある．いま，空間グラフ $f(G)$ が**アキラル**であるとは，$f(G)$ とその鏡像が同型であるときをいう．これは化学に由来する用語で，特に $f(G)$ が結び目や絡み目の場合は，**もろ手型**の定義にほかならない．アキラルでない空間グラフは**キラル**であるという．さて，化学において，分子中の原子を頂点，原子間の共有結合を辺と考えることで，1 つの空間グラフが得られる．これを**分子構造式**という．特に絡み目を分子構造式に持つ分子は**カテナン**と呼ばれ，1960 年に

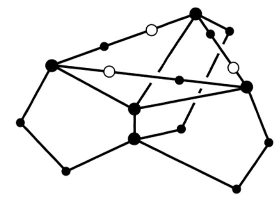


図 10　K_5 と同相な分子構造式．

実際にそのような分子が Wasserman により初めて合成された．図 10 は，1981 年に合成された，K_5 と同相な分子構造式の例である．ここで●は炭素原子 C，○は酸素原子 O を表す．

分子式が同じであるが分子構造式が異なるような 2 つの分子は**立体異性体**と呼ばれ，立体異性体であることの判定は，数学的には空間グラフの分類の問題となる．特に**鏡像異性体**の研究の観点から，空間グラフのアキラル性，キラル性の問題が直接的な応用を持つ．分子構造式においては各原子に対応する頂点が意味を持つので，空間グラフの同型の定義は，化学的事情によって多少強めて考えることもある．例えば図 10 の分子構造式では，K_5 に対応する各辺が C–C，C–C–C–C，C–C–O–C の 3 種類に分かれており，それぞれ同じ種類の辺に移す全同位の下で鏡像と同型でないことが知られている[14)]．即ち，その意味でこの分子構造式はキラルである．さらに前節で述べたグラフの内在性と関連して，$\mathbb{R}^3$ にどのように埋め込んでも，その像がキラルであるグラフが存在する．そのようなグラフは**内在的にキラルである**といわれ，例えば自然数 m に対し，K_{4m+3} は内在的にキラルであることが知られている[2)*8)]．K_{4m+3} は K_7 を部分グラフとして含むので結び目内在でもある．即ち，K_{4m+3} と同相な分子構造式があれば，それは必ず鏡像異性体を持ち，かつ必ず非自明な結び目を含む．また，分子構造式において原子間の共有結合に対応する各辺は線分と考えるのが自然であることから，各辺が本当にまっすぐな線分である空間グラフ（**線形埋め込み**などと呼ばれる）の

---

*8)　一方，$n \neq 4m+3$ の場合は K_n の埋め込みの像でアキラルなものが存在するので[2)]，内在的にキラルであるという性質はマイナーに関して閉じていない．

研究にも近年注目が集まっている．そこでは，$\mathbb{R}^3$ の点の配置の問題という観点から有限幾何学との相性がよく，例えば K_7 の $\mathbb{R}^3$ への線形埋め込みの像は必ず三葉結び目を含むことが，有限幾何学と計算機の援用により示された[*9]．一方，2000 年代初頭に世界を騒がせた，いわゆる狂牛病などのプリオン病を引き起こす異常プリオン蛋白分子について，その立体構造を空間グラフのモデルでトポロジーの立場から解析することも試みられている[5]．

6. おわりに

空間グラフの理論のこの 30 年ほどの間の大きな発展には，日本人トポロジストの仕事が大きく貢献している．1995 年には，この分野を解説した和書が出版された[7]．また，2003 年に North Carolina 大学で開催されたアメリカ数学会分科会の席上での，Flapan の「日本で空間グラフのワークショップをやろう」という提案から，2004 年に第 1 回空間グラフ理論国際ワークショップが東京で開催された（2010 年，2013 年にも東京で開催）．現代的な装いを纏った空間グラフの理論は，今後も低次元トポロジーの一分枝として，また分子のトポロジーの理論的支柱として，その存在感を発揮していくことと思う．自然科学へのさらなる驚くべき応用が見出されるのも，そう遠い未来ではないことを期待したい．

参考文献

1) J.H. Conway and C. McA. Gordon, Knots and links in spatial graphs, *J. Graph Theory* **7** (1983), 445–453.
2) E. Flapan and N. Weaver, Intrinsic chirality of complete graphs, *Proc. Amer. Math. Soc.* **1** (1992), 233–236.
3) A. Ishii, Moves and invariants for knotted handle-bodies, *Algebr. Geom. Topol.* **8** (2008), 1403–1418.
4) A. Kawauchi, Almost identical imitations of (3, 1)-dimensional manifold pairs, *Osaka J. Math.* **26** (1989), 743–758.
5) A. Kawauchi and K. Yoshida, Topology of prion proteins, *Journal of Mathematics and System Science* **2** (2012), 237–248.
6) S. Kinoshita, Elementary ideals in knot theory, *Kwansei Gakuin Univ. Annual Stud.* **35** (1986), 183–208.
7) 小林一章，『空間グラフの理論』，培風館，1995.
8) H. Moriuchi, An enumeration of theta-curves with up to seven crossings, *J. Knot Theory Ramifications* **18** (2009), 167–197.
9) H. Moriuchi, A table of handcuff graphs with up to seven crossings, *Knot Theory for Scientific Objects, OCAMI Studies* **1**, 179–200, Osaka Municipal Universities Press, 2007.
10) R. Nikkuni, A refinement of the Conway-Gordon theorems, *Topology Appl.* **156** (2009), 2782–2794.
11) N. Robertson, P. Seymour and R. Thomas, Sachs' linkless embedding conjecture, *J. Combin. Theory Ser. B* **64** (1995), 185–227.
12) H. Sachs, On spatial representations of finite graphs, *Finite and infinite sets, Vol.I, II (Eger, 1981)*, 649–662, Colloq. Math. Soc. Janos Bolyai, **37**, North-Holland, Amsterdam, 1984.
13) M. Scharlemann and A. Thompson, Detecting unknotted graphs in 3-space, *J. Diff. Geom.* **34** (1991), 539–560.
14) J. Simon, Topological chirality of certain molecules, *Topology* **25** (1986), 229–235.
15) S. Suzuki, On linear graphs in 3-sphere, *Osaka J. Math.* **7** (1970), 375–396.
16) K. Taniyama, Cobordism, homotopy and homology of graphs in R^3, *Topology* **33** (1994), 509–523.
17) S. Yamada, An invariant of spatial graphs, *J. Graph Theory* **13** (1989). 537–551.
18) Y. Yokota, Topological invariants of graphs in 3-space, *Topology* **35** (1996), 77–87.

（にっくに・りょう，東京女子大学現代教養学部）

*9) 現在では，定理 4.1 のある種の精密化の応用により，トポロジーの結果の系としても得られる[10]．

DNA トポロジー

DNA に働く酵素の数学的研究



下川 航也

1. イントロダクション

DNA は Watson と Crick[16]により発見された二重らせん構造を持っている．その二重らせんの中心軸を考えると，3 次元空間内の紐が得られる．特に環状 DNA を考えると，結び目や絡み目が対応する．この結び目や絡み目が，今回考える DNA の持つトポロジーである．DNA トポロジーの研究は，数学などの理論を DNA の持つトポロジーの情報に応用し，生物学的に有用な結果を導き出すものである．本稿では，数学の一分野である結び目理論の DNA トポロジーへの応用について解説する[*1]．

DNA トポロジーの生物学的視点の教科書として，Bate と Maxwell による著書 3) が挙げられる．結び目理論の DNA トポロジーへの応用は，文献 1, 2, 8, 11, 12, 14) で扱われているので，参照してほしい．

2. 結び目，タングル，有理結び目

結び目は，空間内の閉じた紐である．紐が 2 本以上あるとき，**絡み目**と呼ぶ．本稿では，結び目や絡み目のトポロジーを考察するため，ある結び目から他の結び目に連続的に変形できる場合，同じ結び目とみなす（図 1 参照）．結び目を一つ決めても図はいろいろあるが，交差の数が最も少ない図の交差の数を，結び目の**交点数**という．例えば，図 1 の三葉結び目の交点数は 3 である．

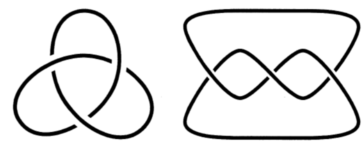


図 1 これらの結び目は一方から他方へ連続的な変形で移れるので同じ結び目であり，三葉結び目と呼ばれている．三葉結び目の交点数は 3 である．

まず，結び目や絡み目を構成する材料として，タングルを導入する．**タングル**は，3 次元球体とその中の 2 本の紐の組である．ただし，2 本の紐の端は 3 次元球体の表面上にあるとする．図 2 (A) を参照してほしい．球体を捻ることにより，紐の交差をなくすことができるとき，**有理タングル**と呼ぶ．図 2 (A) の 2 つのタングルは，両方とも有理タングルである．有理タングルは，構造が最も単純なタングルの例である．

タングルの外側に 2 本の紐を図 2 (B) のように付け加えると，タングルから結び目，または，絡み目が構成できる．こうして得られる結び目や絡み目をタングルの**分子**という．**有理結び目**（**有理絡み目**）とは，有理タングルの分子として構成される結び目（絡み目）である．交点数が少ない結び目の多くが有理結び目である．

図 2 (C) のようにタングル S とタングル T を

*1) 本研究は JSPS 科研費 25400080, 26310206 の助成を受けたものです．

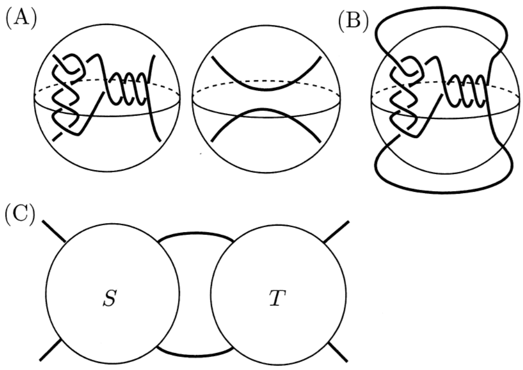


図2 タングルは3次元球体とその中の2本の紐の組である．(A) はタングルの例である．(B) はタングルの分子を取る操作により得られる有理絡み目である．(C) はタングル S と T から新しいタングル $S+T$ を得るタングル和を表している．

つなげる操作を考える．この操作で全体がタングルとなるとき，**タングル和**と呼び，$S+T$ と表す．

3. DNA のトポロジーと酵素

人の DNA は閉じていない紐状のものであるが，大腸菌の染色体は環状 DNA である．また実験で良く使われる小さな DNA 分子であるプラスミドも環状である．ここで，図3のように，環状 DNA の二重らせん構造の中心軸を考えると，結び目と考えることができる．環状 DNA が2つある場合には絡み目となる．これらが，今回考える DNA の持つトポロジーとなる．

DNA に働く酵素の中には，DNA のトポロジーを変えるものがあることが知られている．そのトポロジーの変化の様子から，顕微鏡を用いた実験では観察することができない酵素複合体内での酵素の働きの様子を，数学を用いて解明することがこの分野の一つの研究課題である．今回は，トポイソメラーゼと部位特異的組換え酵素について解説する．

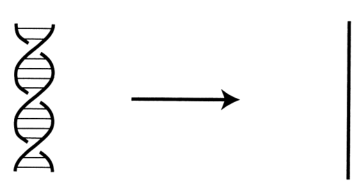


図3 本稿では二重らせん DNA の中心軸を考えることにより，DNA を空間内の紐とみなし，DNA のトポロジーを考察する．

4. トポイソメラーゼ

まず DNA のトポロジーを変える酵素であるトポイソメラーゼについて見てみよう．

DNA の2重らせんのモデルが提出された際に，「なぜ複製された後の2つの DNA は絡まないのか？」ということが問題となった．実際，環状 DNA をそのまま単純に複製しようとすると，新しい2つの環状 DNA は絡んでしまう．

実はトポイソメラーゼという酵素が，この DNA 絡み目を解くことが知られている．トポイソメラーゼ II 型は DNA 絡み目や DNA 結び目に，図4のように交差交換により作用し，DNA のトポロジーを変える酵素である．結び目理論では，どんな結び目や絡み目も，有限回交差交換を行うと，交差のない自明な結び目や絡み目に変形できることが知られているので，トポイソメラーゼが DNA 絡み目を解くことは理論的には可能である．

さらに，トポイソメラーゼは非常に効率的に DNA 絡み目を解消することが知られている[13]．酵素は非常に小さなものであり，DNA 全体のトポロジーを把握するのは無理がある．どのようにトポイソメラーゼが DNA 絡み目を効率的に解消するかについて，いくつかのモデルや仮説が挙げられているが，決定的な解決には至っていない．一つの仮説が論文 5) に述べられている．ここでは，図5のように他の場所に比べて DNA の曲率が高いところに，トポイソメラーゼが作用するというモデルが挙げられている．

トポイソメラーゼの作用を阻害すると，その細胞は分裂ができなくなり，死滅する．トポイソメラーゼの作用の阻害は抗がん剤のメカニズムにも

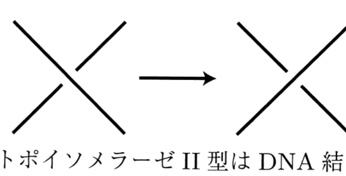


図4 トポイソメラーゼ II 型は DNA 結び目，絡み目に交差交換として作用する．

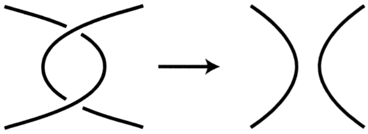


図 5　トポイソメラーゼの作用のモデル．これも交差交換である．DNA 結び目，DNA 絡み目の曲率が高い部分に作用すると，効率的に絡み目が解消できる可能性がある．

使われており，そのメカニズムの解明は，応用面でも大変重要な問題である．この問題には，数学的な研究も十分貢献が期待される．

5. DNA 組換え酵素，バンド手術，タングル方程式

DNA の組換えは，DNA の塩基配列を変える．今回は，大腸菌の染色体やプラスミドに作用する，DNA の部位特異的組換え酵素である Xer というものを考察する．部位特異的組換え酵素とは，DNA のある決まった塩基配列である部位にのみ作用する組換え酵素である．

組換え酵素 Xer は DNA を変形する中間段階として，ホリデイ構造を経由することが知られている．この様子を DNA トポロジーの観点で見ると，DNA の組換えは図 6 のような DNA 結び目や絡み目の局所変形と考えることができる．ここで考える局所変形は，結び目理論ではバンド手術と呼ばれている．この変形では，結び目や絡み目は図に現れる以外の部分では不変であり，図に現れる部分だけ変わっている．バンド手術では，バンドと呼ばれる長方形を結び目や絡み目に 2 辺が接するように配置し，その 2 辺を結び目や絡み目から取り除き，長方形の残りの 2 辺に置き換える操作である．

Ernst と Sumners により導入された部位特異的組換え酵素の数学的モデルでは，酵素複合体内の DNA の様子はタングルを用いてモデル化される（図 7 参照）[7]．部位特異組換え酵素 Xer は，DNA に作用する際にアクセサリータンパク質と共に 3 次元球体状の酵素複合体を構成する．酵素複合体内には，酵素の作用する DNA の部位（矢印で表

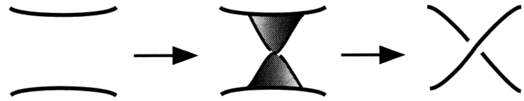


図 6　ホリデイ構造を経由する DNA 組換え酵素の働きは，トポロジーの観点では結び目や絡み目の間のバンド手術とみることができる．

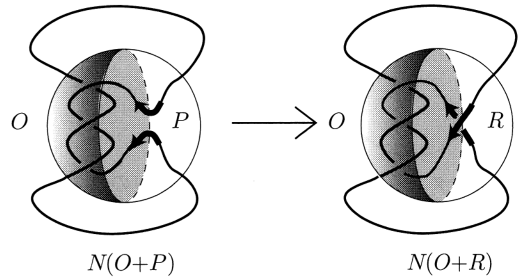


図 7　組換え酵素の働きのタングルモデル．組換えによりタングル P がタングル R に置き換わる．組換えでタングル O の部分と外部の DNA のトポロジーは不変である．この例では，組換えにより DNA のトポロジーは，$N(O+P)$ に対応する自明な結び目から，$N(O+R)$ に対応する 4-cat（図 8 参照）へと変化している．

している）が 2 つ含まれる．酵素複合体内で，組換え酵素が作用する DNA の部分はタングル P で表され，組換え後には R というタングルに変わる．Xer の場合には図 7 の形でモデル化されることが多く，P から R への変化はバンド手術に対応している．酵素複合体内で組換えの際に不変な部分はタングル O で表されている．酵素複合体内の組換え前の DNA はタングル和 $O+P$ で表され，組換え後はタングル和 $O+R$ となる．DNA 全体を考えると，このタングルの分子として得られる結び目や絡み目を用いてモデル化することができる．組換え前の DNA（基質と呼ばれる）に対応する $N(O+P)$ という結び目または絡み目が，組換え後の DNA（生成物と呼ばれる）に対応する $N(O+R)$ という結び目または絡み目に変わる．これを方程式としてまとめると，

$$\begin{cases} N(O+P) = \text{基質}, \\ N(O+R) = \text{生成物} \end{cases}$$

となる．これを**タングル方程式**といい，このようなモデル化を，**DNA 組換えのタングルモデル**という．

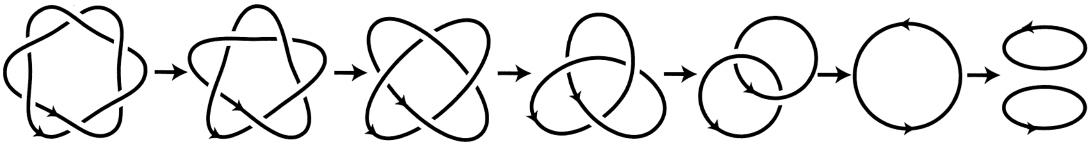


図 8　Xer-*dif*-FtsK による DNA 絡み目の解消経路，6 交点のトーラス絡み目である 6-cat からの絡み目解消経路は，5 交点のトーラス結び目，4-cat，三葉結び目，ホップ絡み目，自明な結び目，自明な絡み目となる．

環状 DNA を用いた実験では，組換えの前の DNA である基質と組換え後の DNA である生成物は，どちらも有理結び目や有理絡み目の場合が多い（もちろんそれ以外の場合もある）．よって，DNA の組換えは有理結び目や有理絡み目間のバンド手術として，数学的にモデル化されることが多い．

このタングルモデルでは，主に次のような問題を考察する．

1.　組換えのメカニズムの特徴付け．
基質と生成物のトポロジーの情報があるとき，タングル P，R，O を特徴付ける．

2.　組換えの経路の特徴付け．
基質のトポロジーと P と R の情報があるとき，生成物のトポロジーを特徴付ける．

次の節で具体的にどのような問題を考えるかを例を用いて解説する．

組換え酵素の働きを特徴付ける研究は，抗生物質の開発などに貢献することが期待されるため，やはり重要な研究分野である．

6. 応用例

応用例として，最近の研究である大腸菌の Xer-*dif*-FtsK という DNA 組換え酵素のシステムのメカニズムの特徴付け[15]を挙げたいと思う．

大腸菌の染色体や小さな DNA 分子であるプラスミドは環状であることが知られている．それらの複製の際に現れる絡み目は，通常は細胞内においてトポイソメラーゼにより解消される．

オックスフォード大学の Sherratt 研究室では，トポイソメラーゼが機能しない状況では，組換え酵素が DNA 絡み目を解くことを，実験で確かめている[9,10]．プラスミドを用いた実験では，Xer-*dif*-FtsK という組換え酵素システムが DNA 絡み目をだんだんと解いていく様子が観察されている．その実験では，交点数が $2m$ である絡み目 $2m$-cat のトポロジーを持つ DNA（トーラス絡み目 $T(2,2m)$ に対応）が，Xer-*dif*-FtsK により交点数が下げられ，最終的に自明な絡み目が得られることが観察されている[9]．図 8 に，6-cat が自明な絡み目に変化していく様子のモデルを挙げる．例えば，6-cat は組換えにより，5 交点のトーラス結び目 $T(2,5)$ に変化している．

我々は論文 15) において，この組換えによる絡み目解消を数学的にモデル化し，実験と照らし合わせても十分説得力を持つ仮定のもので，その絡み目解消経路の特徴付けと，組換えのメカニズムの解明に成功した．

まず，絡み目解消経路の特徴付けについて説明する．DNA 絡み目が，何回かの組換えにより最終的に自明な絡み目が得られている．その途中でどのような結び目や絡み目を経由したかを特徴付けることを考察する．

基質の DNA のトポロジーは，絡み目である $2m$-cat である．今回考える Xer-*dif*-FtsK システムでは，各組換えにおいて絡み目は結び目に変化し，結び目は絡み目に変化する．まず，$2m$-cat から自明な絡み目になるために必要な組換えの回数は $2m$ 回以上であることを，数学的に証明した．これは有向結び目や絡み目の符号数と呼ばれる不変量が，1 回の（同調的）バンド手術によって 1 しか変わらないことから得られるものである．図 8 では，基質の 6-cat が 6 回の組換えで自明な絡み目になる様子が描かれている．

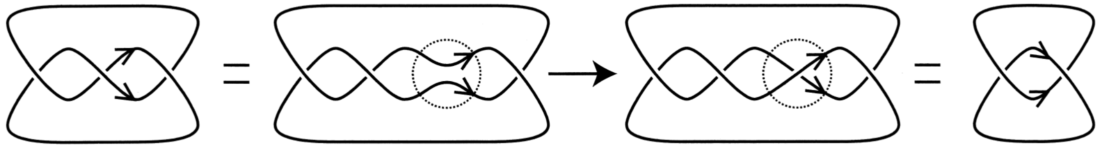


図 9　三葉結び目からホップ絡み目が得られる組換えの様子．バンド手術でモデル化すると，トポロジー的観点ではバンド手術は一意であることが示せる．これは酵素の働き方のトポロジー的な特徴付けを与えている．

論文 9) の実験結果を詳細に考察すると，各組換えにおいて，DNA のトポロジーが簡単になっていることが見て取れる[15]．具体的には，各組換えにおいて DNA 結び目や絡み目の交点数が単調に下がっていると考えられる．組換えをバンド手術で考えると，初めの組換えに対して数学的に考察すべき問題は，「$2m$-cat にバンド手術をして交点数が下がるとする．得られる結び目は何か？」という問題となる．我々が証明した結果は，「結び目は唯一つに定まり，交点数が $2m-1$ であるトーラス結び目 $T(2,2m-1)$ となる．」というものである．また，次の組換えに対応する結果として，「基質がトーラス結び目 $T(2,2m-1)$ の場合には，バンド手術が交点数を下げるとすると，得られる絡み目は $(2m-2)$-cat となる．」ことを示した．これらの結果を順々に用いることにより，$2m$-cat からの絡み目解消経路は，図 8 に挙げた経路に対応する，

$2m$-cat $\to T(2,2m-1) \to (2m-2)$-cat $\to \cdots \to$ 4-cat $\to$ 三葉結び目 $\to$ ホップ絡み目 $\to$ 自明な結び目 $\to$ 自明な絡み目

となることを示すことができた．$2m$-cat はちょうど $2m$ 回の組換えで自明な絡み目となっており，組換えの回数の最も少ない最短経路となっている．

次に，それぞれの組換えのメカニズムの特徴付けを考察する．ここでは三葉結び目からホップ絡み目の組換えについて考察する．論文 6) で得られた数学の結果を用いると，三葉結び目からホップ絡み目を得るバンド手術は，図 9 に挙げたもの唯一つに定まることを示すことができる．これは，酵素の働きのメカニズムの特徴付けを与えるものとなる．さらに，論文 4) の最新の研究成果により，より一般的に，$2m$-cat からトーラス結び目 $T(2,2m-1)$ のバンド手術，および，トーラス結び目 $T(2,2m-1)$ から $(2m-2)$-cat へのバンド手術も同様に特徴付けることができた．

これにより，上で特徴付けた経路における組換えのメカニズムが全て特徴付けられたこととなり，Xer-*dif*-FtsK システムによる DNA 絡み目解消の数学的な解明が完成した．

7. 今後の研究

今回紹介した Xer と呼ばれる組換え酵素以外にも，DNA のトポロジーの変化が観察されている酵素は存在する．さらに，現在までに特徴付けされていないような結び目や絡み目の間のバンド手術に対応するトポロジーの変化を与える組換えの存在も知られている．数学的にもそのような酵素の働きの特徴付けは，新しいアイデアを必要とする難しい研究課題であり，今後取り組むべき問題である．

本稿では，結び目の研究の DNA に働く酵素の研究への応用を紹介したが，同様の手法の他の分野への応用も期待されている．DNA 以外の高分子においても，そのトポロジーの変化を与える方法は研究されており，今回紹介したようなバンド手術や他の結び目の局所変形の分類は，様々な応用がある．高分子以外にも，自然界には閉じた紐状のものは数多く存在し，そのトポロジーを変える作用も存在するので，今回紹介した方法や結果がが多くの場面に応用されることを期待している．

参考文献

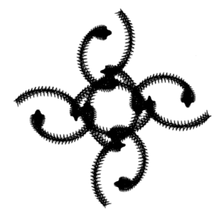
1) C.C. Adams, “The Knot Book: An Elementary Introduction to the Mathematical Theory of Knots”, New York: W.H. Freeman, 1994（日本語訳『結び目の数学』金信泰造訳，培風館 (1998)）.

2) J. Arsuaga, Y. Diao and M. Vazquez, Mathematical methods in DNA topology: Applications to chromosome organization and site-specific recombination, in "Mathematics of DNA Structure, Function and Interactions", The IMA Volumes in Mathematics and its Applications Volume 150, Springer, 2009, pp.7–36.
3) A.D. Bates and A. Maxwell, "DNA Topology (2nd ed.)", Oxford university press, 2005.
4) D. Buck, K. Ishihara, M. Rathbun, and K. Shimokawa, Band surgeries and crossing changes between fibered links, submitted (arXiv:1304.6781).
5) G.R. Buck, and E.L. Zechiedrich, DNA disentangling by type-2 topoisomerases, *J. Mol. Biol.* **340** (2004), 933–939.
6) I.K. Darcy, K. Ishihara, R. Medikonduri and K. Shimokawa, Rational tangle surgery and Xer recombination on catenanes, *Algebr. Geom. Topol.* **12** (2012), 1183–1210.
7) C. Ernst and D.W. Sumners, A calculus for rational tangles: Applications to DNA recombination, *Math. Proc. Cambridge Philos. Soc.* **108** (1990), 489–515.
8) E. Flapan, "When Topology Meets Chemistry: A Topological Look at Molecular Chirality", Cambridge University Press, 2000.
9) I. Grainge, M. Bregu, M. Vazquez, V. Sivanathan, S. CY Ip and D.J. Sherratt, Unlinking chromosome catenanes in vivo by site-specific recombination, *EMBO J.* **26** (2007), 4228–4238.
10) S.C.Y. Ip, M. Bregu, F.X. Barre, and D.J. Sherratt, Decatenation of DNA circles by FtsK-dependent Xer site-specific recombination, *EMBO J.* **22** (2003), 6399–6407.
11) K. Ishihara, K. Shimokawa, and M. Vazquez, Site-specific recombination modeled as a band surgery: Applications to Xer recombination, in "Discrete and Topological Models in Molecular Biology", pp.387–401, 2014, Natural Computing Series, Springer.
12) 村杉邦男,『結び目理論とその応用』, 日本評論社 (1993).
13) V.V. Rybenkov, C. Ullsperger, A.V. Vologodskii, and N.R. Cozzarelli, Simplification of DNA topology below equilibrium values by type II topoisomerases, *Science* **277** (1997), 690–693.
14) 佐伯修, DNA 結び目のメカニズム,『技術に生きる現代数学』若山正人編, 175–204. 岩波書店 (2008).
15) K. Shimokawa, K. Ishihara, I. Grainge, D.J. Sherratt, and M. Vazquez. FtsK-dependent XerCD-*dif* recombination unlinks replication catenanes in a stepwise manner, *Proc. Natl. Acad. Sci. U.S.A.* **110** (2013), 20906–20911.
16) J.D. Watson and F.H.C Crick, A structure for deoxyribose nucleic acid, *Nature* **171** (1953), 737–738.

(しもかわ・こうや, 埼玉大学大学院理工学研究科)

特集／応用するトポロジー

結び目のエネルギー



今井 淳

1. はじめに

結び目のエネルギーは結び目の「きれいな形」を得るために導入された．筆者が修士2年の夏休みに，修論のネタに困って，トポロジーの未解決問題集をパラパラ見ていたところ，後述の作間誠先生の問題が目に留まり，それを元に「結び目のエネルギー」というタイトルの修士論文を提出したのが1988年．それから四半世紀が経ったのかと思うと，大変感慨深いものがある．

結び目のエネルギーはトポロジー（結び目理論）的なモチベーションから生まれたものの，その後微分幾何，メビウス幾何，積分幾何，偏微分方程式（PDE）やポテンシャル論などの解析，更には数値実験を通じて統計物理，高分子科学やDNAなど，数学以外の研究とも関わることになった．

ここでは，その研究の流れのごく一部を（筆者の興味に従って）紹介したい．

2. $r^{-\alpha}$-ポテンシャルエネルギーの有限部分

2.1 動機と定義

“結び目の空間上になんらかの「エネルギー」を定義し，それによって，各々の結び目型に対し，それを代表する結び目を，その結び目型の中でエネルギーの最小値を与えるようなものとして定めよ．この代表的な結び目は，対称性を持つなど，きれいな形であることが望ましい.”

これが結び目のエネルギーの導入の動機となった問題で，作間誠先生，福原真二先生により独立に提唱された．

この問題を解くため，結び目が自己交叉しようとすると $+\infty$ に発散するような汎関数を考え，これを**結び目のエネルギー**と呼ぶことにする．エネルギーを減らすように結び目を変形していく途中で自己交叉があると，結び目型が変わってしまうかもしれないので，それを防ぐためである（図1参照）．さらに，下に有界であることと，なんらかの意味で連続であることも仮定しておく．

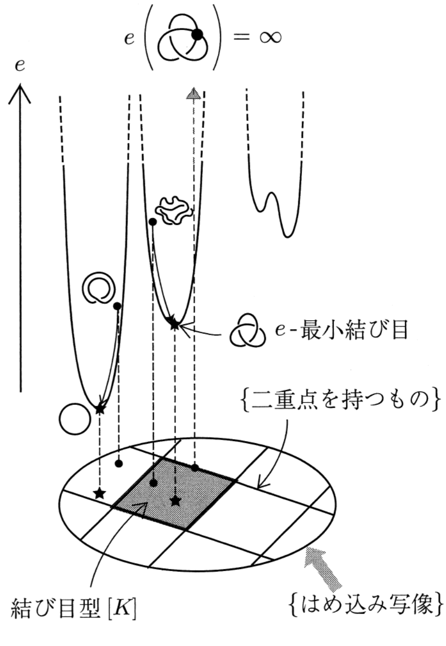


図1 モチベーション．

そのようなものとして，結び目が荷電しているとしたときの静電エネルギーがまず思い浮かぶ．結び目の2点が近づくと，クーロン斥力により反発し，エネルギーが上がると期待されるからである．これは K を結び目として

$$\int_{K\times K}\frac{dxdy}{|x-y|} \tag{1}$$

で与えられるが，任意の結び目で $+\infty$ に発散してしまう．

2.2 発散積分の有限部分

一般に，積分 $\int_X \omega$ が，ω が $X \supset \Delta$ 上 ∞ になってしまうため発散するとする．このとき，$N_\varepsilon(\Delta)$ を Δ の ε-近傍とし，$\Phi(\varepsilon)=\int_{X\setminus N_\varepsilon(\Delta)}\omega$ を ε の級数に展開する．$\varepsilon \to 0^+$ で $\Phi(\varepsilon)\to+\infty$ となるので，ε の負の冪を含むものになる（冪は整数とは限らない．また $\log(1/\varepsilon)$ 項を含む場合もある）．この定数項，つまり $\varepsilon \to 0^+$ で発散する部分を捨てて得られるものを，発散積分の（**アダマールの**）**有限部分**といい $\mathrm{Pf}\int_X\omega$ と書く*1)*2)．

2.3 所謂メビウスエネルギー

さて今の場合，$X=K\times K$ で Δ はその対角成分となる．発散積分 (1) の有限部分は結び目が自己交叉しても発散しないため，結び目のエネルギーにならないことが分かる．そこでもう一工夫必要になる．簡単なのは (1) 式の分母の冪の指数（以下 α とする）を 1 より大きくすることである．

$\alpha<3$ のとき ε の負冪が現れるのは1項のみで，しかもその係数が簡単であることから，発散積分 $\int_{K\times K}|x-y|^{-\alpha}dxdy$ の有限部分を容易に取り出すことができる．そしてそれは，$\alpha\geq 2$ のときに結び目のエネルギーになる．そこでまず $\alpha=2$ の場合について考察しよう．このとき有限部分[1]は，

$$E_\circ(K) = \lim_{\varepsilon\to 0^+}\left(\int_{K\times K\setminus N_\varepsilon(\Delta)}\frac{dxdy}{|x-y|^2}-\frac{2L(K)}{\varepsilon}\right),$$

（ただし $L(K)$ は K の長さ）で与えられる．この $E_\circ(K)$ は，結び目 K の2点 x,y の間の弧長を $\delta(x,y)$ で表すと，

$$E_\circ(K) = -4+\int_{K\times K}\left(\frac{1}{|x-y|^2}-\frac{1}{\delta(x,y)^2}\right)dxdy \tag{2}$$

となることがわかる[2]．

Freedman–He–Wang は，まず $E_\circ$ がメビウス変換で不変となることを示した（このため $E_\circ$ は**メビウスエネルギー***3)とも呼ばれる）．メビウス変換とは，球面に関する反転の合成として表すことができるような $\mathbb{R}^3\cup\{\infty\}$ の変換である（次元を落とすと，$\mathbb{R}^2\cup\{\infty\}\cong\mathbb{C}\cup\{\infty\}$ のメビウス変換は1次分数変換と複素共役で生成される）．

Doyle と Schramm によるコサイン公式を紹介する．$K\ni x,y$ に対し，点 x で K に接し点 y を通る円を $\Gamma(x,x,y)$ で表す．$\Gamma(x,x,y)$ と $\Gamma(y,y,x)$ のなす角度 θ を x と y の間の共形角と呼ぶ．すると

$$E_\circ(K)=\int_{K\times K}\frac{1-\cos\theta}{|x-y|^2}\,dxdy$$

となる．2つの円の間の角度および2次微分形式 $dxdy/|x-y|^2$ が共にメビウス変換で不変であることから，これは $E_\circ$ のメビウス不変性の一つの証明を与える．

2.4 エネルギー最小結び目の存在

それでは，最初に挙げた動機となった問題は，この $E_\circ$ についてはどうなるだろうか．

Freedman たちはメビウス不変性を用い，**素な結び目型**には，$E_\circ$-最小結び目が存在することを示した．ここで結び目が素であるとは，非自明な2つの結び目の連結和とならないことをいう（図2）．一

*1) 結び目のエネルギー周辺では，繰り込みと呼んでいた．Hadamard が既にやっていたということを，（坂田繁洋氏を通して）教えて頂いた相川弘明先生に感謝いたします．

*2) われわれの文脈で興味深いのは，M を多様体として $X=M\times M$ 上の距離のある冪 $d(x,y)^s$ の積分で，このとき Δ は対角成分 $\{(x,x): x\in M\}$ となる．$\Phi(\varepsilon)$ を級数展開すると，係数に幾何学的に意味のある量が現れる

*3) これは Freedman たちのネーミングである．Möbius が定義したものではないものに Möbius の名前を付けることは，オリジナリティーの所在を読者に誤解させるのにはいいやり方であった．メビウス変換で不変になる結び目のエネルギーは他にも存在するので，その意味でもこのネーミングは不適切だと思うが，残念なことにポピュラーになってしまった．

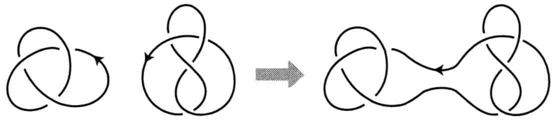


図 2　素でない（合成）結び目（右）．

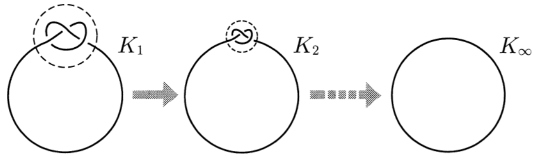


図 3　プルタイト．

方，素でない結び目型については，Kusner–Sullivan が数値実験から，$E_\circ$-最小結び目が存在しないと予想している．

この違いはどこからくるのだろうか．エネルギーが $\inf_{K'\in[K]} E_\circ(K')$ に収束する結び目の列 $K_n \in [K]$ をとる．ところがその極限は同じ結び目型に入るとは限らない（図 3）．結び目が素な場合は，タングルをメビウス変換である程度大きくして，リラックスした状態にしてから極限をとれば，同じ結び目型に入るようにできる．ところが，合成結び目だと，一方のタングルを大きくすると，他方はますます小さくなってしまうのだ．

汎関数の最小を与える埋め込み写像が与えられたアンビエントイソトピー類の中にあるかどうか，という大域解析的な問題の答えが，半分は予想であるにせよ，位相的な条件で変わる（と予想される）という点が面白いと思う．

3. 一般化

最初に紹介した問題，つまり結び目に対し結び目不変量ではなくて，幾何学的な複雑さを測る量を考え，それに関して最適な形を探る，という問題は，その後「幾何学的結び目理論」と呼ばれるものを生み出した．上述のメビウスエネルギーの拡張，およびやや毛色の違うエネルギーが次々と研究された．

3.1 $r^{-\alpha}$-ポテンシャルエネルギー ($\alpha > 2$)

すべての結び目型にエネルギー最小結び目が存在するようにするにはどうすればよいだろうか．前節で分母の冪 α の残った可能性，$2 < \alpha < 3$ の場合を考える．このときエネルギーはスケール不変ではないので，結び目は長さ 1 と正規化しておく．すると $\alpha = 2$ のとき（“critical” ケース）と $2 < \alpha < 3$ のとき（“subcritical” ケース）では全く状況が異なってくる．このような現象は他のエネルギー，例えば後述の Menger 曲率積分のときにも現れる．

$\alpha > 2$ のとき $\int_{K\times K} |x-y|^{-\alpha} dxdy$ を繰り込んで得られるエネルギーを $E^{(\alpha)}$ と書く．すると $E^{(\alpha)}(K)$ が有界であることと，$K = f(S^1)$ として f があるソボレフ空間に入ることが同値となる．このことを用いると，$\alpha > 2$ のとき $E^{(\alpha)}(K)$ が有界ならば f はリプシッツ条件を満たし，f' はヘルダー条件を満たすことが分かる．局所的には f' のヘルダー条件から結び目はあまり急に曲がれず，大域的にはリプシッツ条件から結び目は自分自身にあまり近づけない．このことから，任意の結び目型に $E^{(\alpha)}$-最小結び目が存在することが従う．

3.2 ロープ長

今まで見てきたような 2 点間の距離の冪の発散積分の有限部分として得られるポテンシャルエネルギーとはタイプの異なるものもある．その一つが**ロープ長**である．これは与えられた結び目を太さ 1 のロープで作るのに必要な長さであり，**太さの逆数**である．ここで，太さとは，長さ 1 の結び目をどれだけ太くできるか，という量である．太さは局所的には曲率半径で，大域的には “極小距離” の半分で抑えられる．これを統合したものが **Menger 曲率**である．$\Gamma(x,y,z)$ を K の 3 点 x, y, z を通る円とする．$x = y \neq z$ なら前述のとおり x で K に接し z を通る円，$x = y = z$ なら接触円とすれば Γ は $K\times K\times K$ 上で定義できる．すると K の太さは $\Gamma(x,y,z)$ の半径の最小値と等しい．

ロープ長は結び目のエネルギーになる．結び目型の中でロープ長を最小とするようなものを **ideal knot** という．DNA 研究者である Stasiak たちのネーミングである．コンパクトにギュッとつまった結ばれたソリッドトーラスといったイメージで

ある．

3.3 Menger 曲率積分

$$\int_{K\times K\times K}\frac{dxdydz}{r(\Gamma(x,y,z))^p}$$

（ただし r は半径）は **Menger 曲率積分**と呼ばれ，$p\geq 3$ で結び目のエネルギーとなる．$p=3$ のときスケール不変，$p>3$ で $\alpha>2$ のときの $E^{(\alpha)}$ と似た性質を持つ．

3.4 その他の一般化

興味深い一般化を 2 つ紹介する．

一つは曲面（一般に部分多様体）のエネルギーである．メビウス不変になるように拡張された．発散積分の有限部分（Auckly–Sadun）とコサイン公式の一般化（Kusner–Sullivan）の 2 つが知られている．

もう一つは，ポテンシャルエネルギーの定義の積分の式で，距離の冪を複素数にして $\int_{K\times K}|x-y|^s\,dxdy$ を $\mathbb{C}\ni s$ の複素関数と考え，積分が収束する $\mathfrak{Re}\,s>-1$ から解析接続する，というもので，Brylinski の**結び目のベータ関数**という．$s=-2$ のときはメビウスエネルギーと一致する．これの曲面版もある．

4. メビウス幾何学

この部分はフランス・ブルゴーニュ大学の Rémi Langevin 氏[*4)]との共同研究である．

4.1 無限小非調和比

$\mathbb{C}$ の 4 点 $w, w+dw, z, z+dz$ の非調和比をとって $\wedge$ をつけたもの

$$\omega_{\rm cr}=\frac{dw\wedge dz}{(w-z)^2}$$

を無限小非調和比と呼ぶ．$\mathfrak{Re}\,\omega_{\rm cr}$, $\mathfrak{Im}\,\omega_{\rm cr}$ ともに $\mathbb{R}^2\times\mathbb{R}^2\setminus\Delta$（$\Delta$ は対角成分）の完全形式で，メビウス変換の対角作用で不変（$\mathfrak{Im}\,\omega_{\rm cr}$ は符号を除いて）である．$\mathfrak{Re}\,\omega_{\rm cr}$ は $S^2\times S^2\setminus\Delta$ の完全形式に拡張され，これは同一視 $S^2\times S^2\setminus\Delta\cong T^*S^2$ を通して余接束 T^*S^2 の標準的シンプレクティック形式[*5)]と一致する．この意味で $\mathfrak{Re}\,\omega_{\rm cr}$ は T^*S^n の標準的シンプレクティック形式として $S^n\times S^n\setminus\Delta$（これは S^n の有向 S^0 の空間と思える）上の完全形式に拡張[*6)]される．これを ω_{S^n} とする．

K を結び目とする．K 上の 4 点 $x, x+dx, y, y+dy$ を通る球面を複素球面と同一視して非調和比をとって得られる複素"2 次形式" Ω を**結び目の無限小非調和比**という．$\mathfrak{Re}\,\Omega$ は ω_{S^3} を引き戻したものになる．$\mathfrak{Im}\,\omega_{\rm cr}$ が $S^3\times S^3\setminus\Delta$ には拡張しないため，$\mathfrak{Im}\,\Omega$ は共形角が 0 になるところで特異性を持つ可能性がある．$|\Omega|=|x-y|^{-2}\,dxdy$ となることから，メビウスエネルギーは

$$E_\circ(K)=\int_{K\times K}|\Omega|-\mathfrak{Re}\,\Omega$$

と表される．

4.2 メビウス積分幾何

S^3 でメビウス幾何学を展開する自然な枠組みは，符号 $-++++$ の不定値内積 $\langle\cdot,\cdot\rangle$ を持つ 5 次元ミンコフスキー空間 $\mathbb{R}^5_1$ と不定値内積を保つ"直交群"であるローレンツ群 $O(4,1)$ の組である．S^3 は光錐 $\{x:\langle x,x\rangle=0\}$ の原点を通る直線全体の集合と同一視され，それへのローレンツ群の作用としてメビウス変換は実現される．

S^3 の余次元 k 有向球面全体の集合は $\mathbb{R}^5_1$ の余次元 k 時間的（つまり光錐と横断的に交わる）有向部分空間のなすグラスマン多様体と同一視でき，$O(4,1)$ 不変な測度が入る．特に $k=1$ のとき，S^3 の有向球面全体の集合はド・ジッター空間（擬球 $\{x:\langle x,x\rangle=1\}$）と同一視できる．

これらの空間上で積分幾何を展開しようとすると，ローレンツ群のノンコンパクト性が様々な困難を生み出す．なんらかの方法でコンパクト性を保証するなり，発散積分の有限部分を取るなり，何かしらの対策が必要である．

コンパクト性を用いる対策の例を挙げよう．結び目 K と 4 点以上で交わる球面の重み付き測度

---

*4) ランジュヴァン方程式の Paul Langevin の曾孫であるとのこと．

*5) $S^2=\partial\mathbb{H}^3$ に注意すると，3 次元双曲空間の測地線全体のなす空間のシンプレクティック形式だと思うこともできるし，frame を用いた定式化もある．

*6) 一方無限小非調和比の虚部 $\mathfrak{Im}\,\omega_{\rm cr}$ は S^n の中の有向余次元 2 球面の空間上のケーラー形式に拡張される．

はメビウス不変な結び目のエネルギーになり，

$$\int_{K\times K}\frac{\sin\theta-\theta\cos\theta}{|x-y|^2}\,dxdy$$

で与えられる．ここで θ は共形角である．

5. ポテンシャルの有限部分と重心の一般化

結び目の $r^{-\alpha}$-ポテンシャルエネルギーは，まず結び目上の点 x の“電位”を $\int_K|x-y|^{-\alpha}dy$ $(\alpha<1)$ またはその有限部分 $(\alpha\geq 1)$ により定義し，それを K 上で積分して得られる．この節では，この“電位”をユークリッド空間のコンパクトボディー（その内部の閉包と一致する部分集合）に対して定義し，幾何的な問題を調べよう．

5.1 三角形の灯心

発端は，PISA の次の問題「三角形の公園 Ω のどこに街灯を置くべきか？」である．PISA の用意した解答は外心（鋭角三角形または直角三角形の場合は，公園で最も暗くなる地点を最も明るくするような点）だったが，これに福岡大の柴田勝征先生が異を唱え，公園が受け取る光の総量を最大にする点もこの問題の解答になることを指摘し，これを**灯心**と呼んだ．問題の数学的定式化は，街灯の高さ h を考慮する場合と，$h=0$ とする場合に分かれる．

5.2 リース型ポテンシャルの有限部分

街灯の高さを 0 とすると，点 x に街灯があるときの公園が受け取る光の総量は $\displaystyle\int_\Omega\frac{dy}{|x-y|^2}$ で与えられるが，これは $x\in\Omega$ のとき ∞ に発散する．そこでその有限部分を考える．

より一般の設定で，Ω を $\mathbb{R}^m$ のコンパクトボディとする*7)．点 x におけるポテンシャルを

$$V_\Omega^{(\alpha)}(x)=\int_\Omega|x-y|^{\alpha-m}dy \qquad (3)$$

で定めると，この積分は $\alpha>0$ で収束し，$0<\alpha<m$ のとき**リースポテンシャル**と呼ばれ，前世紀半ば頃より解析で研究されてきたものである．

*7) 結び目の無限小非調和比と同じ記号だが，混同の恐れはないと思う．

Ω の特性関数を χ_Ω とすると，χ_Ω と $|x|^{\alpha-m}$ との畳み込みと等しい*8)．

$\alpha\leq 0$ の場合，そのままでは $x\in\Omega$ のとき積分が発散するが，2.2 節で述べた有限部分を取り出し，それで得られるものを同じ記号で表すものとする．すると $\alpha<0$ ならば

$$V_\Omega^{(\alpha)}(x)=-\int_{\Omega^c}|x-y|^{\alpha-m}dy<0$$

（ただし Ω^c は Ω の補集合）となる．

5.3 $r^{\alpha-m}$-中心

$V_\Omega^{(\alpha)}$ の最大・最小を与える点を Ω の **$r^{\alpha-m}$-中心**と呼ぶ．ただし，$\alpha=m$ のとき $V_\Omega^{(m)}$ は定数関数 $\mathrm{Vol}(\Omega)$ になってしまうので，代わりに log ポテンシャルを考え，$V_\Omega^{\log}(w)=\int_\Omega-\log|w-z|\,dz$ を最大にする点とし，$\alpha\leq 0$ ならば，点 x が Ω の内側（または外側）から境界 $\partial\Omega$ に近づくと $V_\Omega^{(\alpha)}(x)$ は $-\infty$（外側なら $+\infty$）に発散するので，$V_\Omega^{(\alpha)}$ を Ω の内部 $\mathring{\Omega}$ に制限したものを最大にする点とする．

例　$\alpha=m+2$ とすると

$$V_\Omega^{(m+2)}(x)=\int_\Omega|x-y|^2\,dy$$

となるので，$\partial V_\Omega^{(m+2)}/\partial x_i\,(x)=0$ を解くと，$x=(\int_\Omega y\,dy)/(\int_\Omega 1dy)$，つまり r^{m+2}-中心は重心となる．

また，柴田先生の三角形の灯心は $\alpha=0$ の場合に対応する．（鈍角でない）三角形だと，$\alpha\to+\infty$ で外心に，$\alpha\to-\infty$ で内心になる．

5.4 ポテンシャルの性質

(1) Ω が凸で $\alpha\neq 0$ のとき，$V_\Omega^{(\alpha)}$ は凸幾何学で知られていた Lutwak の双対体積の $(1/\alpha)$ 倍になり，$r^{\alpha-m}$-中心は Herburt 他のオーダー α の

*8) 一般に，f に対し

$$I^\alpha f=\frac{2^\alpha\pi^{m/2}\Gamma(\alpha/2)}{\Gamma((m-\alpha)/2)}\int_{\mathbb{R}^m}f(y)\,|x-y|^{\alpha-m}\,dy$$

を f のリースポテンシャルといい，

$$I^\alpha(I^\beta f)=I^{\alpha+\beta}f,\quad \Delta I^\alpha f=-I^{\alpha-2}f$$

が成立する．$I^\alpha f$ は，f をフーリエ変換したものに $|\xi|^{-\alpha}$ をかけ，逆フーリエ変換で戻したものと等しい．

radial center と一致する．

(2) $\alpha \neq 2$ かつ $x \notin \partial\Omega$ ならばそのラプラシアンは

$$\Delta V_{\Omega}^{(\alpha)}(x) = -(\alpha-2)(m-\alpha)V_{\Omega}^{(\alpha-2)}(x)$$

となる．

5.5 $r^{\alpha-m}$-中心の唯一性

コンパクトボディには，任意の α に対し $r^{\alpha-m}$-中心が存在する．しかし，その唯一性はケースバイケースである．東京と大阪に同じ形の公園があったとすると，その真ん中に街灯を立てても両方真っ暗になってしまうので，どちらか一方に立てるしかない．したがって，灯心は（少なくとも）二つあることになる．それでは $r^{\alpha-m}$-中心の唯一性はいついえるのだろうか．

現在のところ証明できているのは，$\alpha \geq m+1$ のとき（容易）と，$\alpha \leq 1$ かつ領域 Ω が凸のときである．Ω が凸ならば，任意の α で唯一性が成立すると予想している．

5.6 高さのある灯心とホットスポット

街灯の高さを h とすると，公園の受け取る光の量は，街灯のランプからみた公園の立体角と等しく，$r = |x-y|$ として

$$A_{\Omega}(x) = \frac{1}{4\pi}\int_{\Omega} \frac{h}{(r^2+h)^{3/2}}\,dy$$

で与えられる．一般に，平面上の関数 f に対し，そのポワッソン積分を

$$Pf(x,t) = \frac{t}{2\pi}\int_{\mathbb{R}^2} \frac{f(y)}{(r^2+t^2)^{3/2}}\,dy$$

で定めると，Pf は上半空間 $\mathbb{R}^3_+$ で調和で，$t=0$ で f となる．高さ h の灯心は，Pf で $f=\chi_{\Omega}$, $h=t^2$ とおいたものの最大点に他ならない．これと似た形の

$$Hf(x,t) = \frac{1}{(4\pi t)^{m/2}}\int_{\mathbb{R}^m} f(y)\exp\left(-\frac{r^2}{4t}\right)dy$$

は熱方程式の初期値 f の解となっていて，時刻 t での $Hf(\bullet,t)$ の最大点を**ホットスポット**という．

これらのことから，立体角など，あるタイプのポテンシャルの最大点の幾何の研究（坂田繁洋氏）は，ある種の PDE の解の幾何の研究につながっていく．

6. 平面領域のエネルギーとその拡張

スペイン・バルセロナの Gil Solanes 氏との共同研究を紹介する．結び目の $r^{-\alpha}$-ポテンシャルエネルギーが“電位”の積分だったように，前節のリース型ポテンシャルの有限部分 $V_\Omega^{(\alpha)}$ の，領域 Ω の上での積分の有限部分を考える*9)．まず平面領域で考え，パラメータ α は，積分したものがスケール不変となるよう，-2 とする．$V_\Omega^{(-2)}$ をそのまま Ω で積分すると発散してしまうので，まず互いに交わらないコンパクトボディ Ω_1, Ω_2 のペアを考え，その相互エネルギー $E(\Omega_1, \Omega_2)$ を

$$\int_{\Omega_1} V_{\Omega_2}^{(-2)}(x)dx = \int_{\Omega_2} V_{\Omega_1}^{(-2)}(x)dx$$

で定めると，これは 4.1 節の ω_{cr} を用いて

$$\int_{\Omega_1\times\Omega_2} \frac{dxdy}{|x-y|^4} = \frac{1}{2}\int_{\Omega_1\times\Omega_2} \Re\mathfrak{e}\,\omega_{\mathrm{cr}} \wedge \Re\mathfrak{e}\,\omega_{\mathrm{cr}}$$

と書ける．$\Re\mathfrak{e}\,\omega_{\mathrm{cr}}$ が完全形式なので，ストークスの定理を 2 回使うと，$\partial\Omega_1 \times \partial\Omega_2$ 上の積分で表すことができる．ここで $\Omega_1 = \Omega_2 = \Omega$ として，発散する積分の有限部分として得られるものを $E(K)$ とする ($K = \partial\Omega$) と，2.2 節の級数展開は，

$$\begin{aligned}&\int_{\Omega\times\Omega\setminus N_\varepsilon(\Delta)} \frac{dxdy}{|x-y|^4}\\ &= \frac{\pi}{\varepsilon^2}A(\Omega) - \frac{2}{\varepsilon}L(\partial\Omega) + E(K) + O(\varepsilon)\end{aligned} \tag{4}$$

(A, L は面積，長さ) と書けることになり，級数の係数に幾何的な量が現れる，ということが分かる．

これを K が空間曲線，つまり結び目になっている場合に拡張しよう．すると，円をメビウス変換群でランダムに動かして，K との絡み数をとり，その二乗を積分したものの有限部分，という積分幾何学的な意味づけができる．また，x と y における接ベクトルのなす角のコサインを $dxdy$ にかけたものを $\overrightarrow{dx}\cdot\overrightarrow{dy}$ と書くと，$E(K)$ は $\int_{K\times K} \overrightarrow{dx}\cdot\overrightarrow{dy}/|x-y|^2$ の*10) 有限部分

$$\lim_{\varepsilon\to 0}\left(-\frac{1}{4}\int_{K\times K\setminus N_\varepsilon(\Delta)} \frac{\overrightarrow{dx}\cdot\overrightarrow{dy}}{|x-y|^2} + \frac{L(K)}{2\varepsilon}\right)$$

としても得られることが分かる．

$E(K)$ を定義する際に，距離というメビウス変換で保たれないものを使って有限部分を取り出したが，結果として得られた $E(K)$ はメビウス不変となる*11)．また，平面内の閉曲線の中では正円が最小値を与えるが，空間曲線の中では，下に有界ではないので，最初に挙げた意味では，結び目のエネルギーにはならない．

*9) 発散する積分の有限部分をとる操作を 2 度行っているが，1 度ですませようとすれば，後述の (4) 式のようになる．

*10) 相互インダクタンスの von Neumann による公式と分母の冪を除いて似たかっこうをしている．

*11) 最近長澤壯之先生と石関彩氏が，メビウスエネルギーの式を変形し，ここに挙げた E と残りに分解することを示し，同時にそれらのメビウス不変性を解析的に証明した．

7. おわりに

紙面と筆者の体力が尽きたため，数値実験と数学以外への応用について述べることができなかったが，最後にまとめておこう．

この問題は取っ付き易いおかげで，幸いにもいろいろな分野の人たちに興味を持ってもらうことができた．異なるバックグラウンドを持つ研究者から予期せぬ新発見があったりして，コンスタントに進展してきていると思っている．特に微分幾何，解析，プログラミングなどの素養があれば，これからも新しい結果が期待できる．「結び目」なんか関係ないと思っている人にも是非興味を持っていただけたらと願っている．

詳細と文献は，未完の集中講義ノート[3]を参照されたい．

参考文献

1) J. O'Hara, *Topology* **30** (1991), 241–247.
2) M.H. Freedman, Z-X. He and Z. Wang, *Ann. of Math.* **139** (1994), 1–50.
3) http://www.comp.tmu.ac.jp/knotNRG/download/12 集中講義.pdf

(いまい・じゅん，首都大学東京大学院理工学研究科)

流体力学とトポロジー

木村 芳文

1. 流体力学とトポロジー

ポアンカレは微分方程式の定性的理論への応用を目的の一つとしてトポロジーを研究したという．定性的理論とは局所的なルールが規定されている力学系が全体として包含している大域幾何学的な情報であると言えよう．流体力学の目的の一つも個々の流れに依らない大域的な概念や情報を探し出すことであり，そういう意味ではトポロジーという言葉が生まれる以前から流体力学はその考え方を共有していたと言えるかもしれない．

水や空気のような流体の運動と形態を扱う学問である流体力学の歴史は非常に古く，ニュートンから始まりベルヌーイ，オイラーといった数学者の貢献を経て，18 世紀半ばには現在の流体力学に通じる連続体力学としての枠組みができ上がったと考えられる．一方，トポロジーという学問が独立するのはポアンカレの仕事が出る 19 世紀末であろうから流体力学の創始からは 100 年以上の時が経っている．もっとも流体力学もオイラーの時代を経て，ナヴィエ，ハーゲン，ポアズイユ，ストークスらの仕事によって粘性の働きの詳細が研究され，粘性流体の方程式が確立するまでには 100 年近い年月が必要であったのではあるが．本稿では流体力学の「トポロジー的応用」の例をいくつか挙げ，流体力学とトポロジーの親和性について紹介したいと思う．

流体力学とトポロジーの関係を示す最も良い例は「渦」という流れの構造である．渦は台風や竜巻などの自然現象やコーヒーカップや風呂桶に現れる渦などの日常生活で頻繁に目にするので直観的になじみの深いものであるが，数学的には 3 次元空間における速度場 $\boldsymbol{u}(\boldsymbol{x},t)$ の回転（rot）で与えられる**渦度**，

$$\boldsymbol{\omega}(\boldsymbol{x},t)=\boldsymbol{\nabla}\times\boldsymbol{u}(\boldsymbol{x},t) \tag{1}$$

が集中した領域のことであると考えられる．渦度の時間発展を求めるには速度場についての方程式が必要である．粘性の効果を取り入れた流体の速度場についての方程式はナヴィエ・ストークス方程式の名前で知られる．ナヴィエ・ストークス方程式には粘性についての仮定に応じていくつかの表現が存在するが，外力のない場合，ニュートン流体の近似の下では次のような方程式が一般的であると考えられる（正確には第 2 粘性率にストークスの関係を用いている[1)]）．

$$\frac{\partial \boldsymbol{u}}{\partial t}+(\boldsymbol{u}\cdot\boldsymbol{\nabla})\boldsymbol{u}=-\frac{1}{\rho}\boldsymbol{\nabla}p+\nu\boldsymbol{\nabla}^2\boldsymbol{u}+\frac{\nu}{3}\boldsymbol{\nabla}(\boldsymbol{\nabla}\cdot\boldsymbol{u}). \tag{2}$$

ここで $\boldsymbol{u}(\boldsymbol{x},t)$ は速度ベクトル，p は圧力，ρ は密度，そして μ を粘性率としたとき $\nu=\mu/\rho$ は体粘性率と呼ばれる．この方程式でさらに非圧縮性 $\boldsymbol{\nabla}\cdot\boldsymbol{u}=0$ を仮定し，右辺最後の項を消去した方程式が通常の非圧縮性ナヴィエ・ストークス方程式として知られるものである．上式右辺の ν に

比例する項は粘性の影響を表すが，これらの項を取り除いた方程式が非粘性流体（完全流体）の運動方程式であるオイラー方程式

$$\frac{\partial \boldsymbol{u}}{\partial t} + (\boldsymbol{u} \cdot \boldsymbol{\nabla})\boldsymbol{u} = -\frac{1}{\rho}\boldsymbol{\nabla} p \tag{3}$$

である（非粘性であっても一般には圧縮性は残っていると考える）．

粘性の作用は流体中の運動量の輸送に関わると考えられる．粘性がない場合には流体粒子の表面にかかる応力は面に垂直な圧力のみであるが，粘性がある場合には速度勾配によって面に対して接線方向の成分を持つ[1,2]．粘性の働きは方程式中で高階の微分で表されるように局所的なものであるが，流体のトポロジーのような大域的な情報に大きな影響を及ぼす．以下にそれを見ていくことにしよう．

2. 流れの保存量としての循環

渦度の時間変化を求めるためにナヴィエ・ストークス方程式 (2) の非線形項を次のように書き換える．

$$(\boldsymbol{u} \cdot \boldsymbol{\nabla})\boldsymbol{u} = \boldsymbol{\nabla}\left(\frac{1}{2}|\boldsymbol{u}|^2\right) + (\boldsymbol{\omega} \times \boldsymbol{u}). \tag{4}$$

これを (2) に代入した後に両辺の回転をとり

$$\boldsymbol{\nabla} \times \left(\frac{\boldsymbol{\nabla} p}{\rho}\right) = \boldsymbol{\nabla}\left(\frac{1}{\rho}\right) \times (\boldsymbol{\nabla} p) + \frac{1}{\rho}\boldsymbol{\nabla} \times (\boldsymbol{\nabla} p) \tag{5}$$

に気をつけると

$$\frac{\partial \boldsymbol{\omega}}{\partial t} + \boldsymbol{\nabla} \times (\boldsymbol{\omega} \times \boldsymbol{u}) = \frac{\boldsymbol{\nabla}\rho \times \boldsymbol{\nabla} p}{\rho^2} + \nu \boldsymbol{\nabla}^2 \boldsymbol{\omega} \tag{6}$$

を得る．上式右辺の最初の項は気象の分野などでは傾圧（バロクリニック）ベクトルと呼ばれており，等密度面と等圧面が平行でない場合（すなわち $\boldsymbol{\nabla}\rho \times \boldsymbol{\nabla} p \neq 0$）にその位置の渦度の値が変化することを意味している[3]．今，液体のように流体が縮まない場合（ρ =const.）や気体であっても等温過程や断熱過程のように圧力 p が温度に依らないと見なされる場合には圧力は密度 ρ のみの関数となる（そのような条件を満たす流れはバロトロピー流と呼ばれる）．その場合 $\boldsymbol{\nabla}\rho$ と $\boldsymbol{\nabla} p$ は平行となって傾圧ベクトルは 0 となり，渦度の発展方程式は

$$\frac{\partial \boldsymbol{\omega}}{\partial t} + \boldsymbol{\nabla} \times (\boldsymbol{\omega} \times \boldsymbol{u}) = \nu \boldsymbol{\nabla}^2 \boldsymbol{\omega} \tag{7}$$

となる．

渦度に関わる保存量として「循環」という量が重要な役割を果たす．循環を Γ とおくとそれは次のように流れの中の任意の閉曲線 C に沿っての速度場の線積分として与えられる．

$$\Gamma = \oint_C \boldsymbol{u} \cdot d\boldsymbol{r} = \iint_S \boldsymbol{\omega} \cdot \boldsymbol{n}\, dS \tag{8}$$

右辺を導くのにはストークスの定理と渦度の定義式 (1) を使った（S は C を外縁とする任意の曲面である）．この関係式から分かるように循環は速度場の閉曲線 C に沿っての線積分であると同時に C が作る面を貫く渦度の束（フラックス）を意味していると言える．今，閉曲線 C が流れによって流される，すなわち閉曲線を構成する流体粒子の運動に伴って C が変化する場合を考えよう．流れに沿っての循環の時間変化を考えるために次のようなラグランジュ微分（物質微分とも言われる）を定義する．

$$\frac{D}{Dt} = \frac{\partial}{\partial t} + \boldsymbol{u} \cdot \boldsymbol{\nabla}.$$

これを Γ に施すと

$$\frac{D\Gamma}{Dt} = \frac{D}{Dt}\oint_C \boldsymbol{u} \cdot d\boldsymbol{r} = \oint_C \frac{D\boldsymbol{u}}{Dt} \cdot d\boldsymbol{r} + \oint_C \boldsymbol{u} \cdot \frac{D}{Dt}(d\boldsymbol{r}) \tag{9}$$

となる．右辺第 2 項の微分は $d\boldsymbol{r}$ を C 上の近傍の 2 点 $\boldsymbol{r}_1, \boldsymbol{r}_2$ の差で $d\boldsymbol{r} = \boldsymbol{r}_1 - \boldsymbol{r}_2$ と近似してそれぞれのラグランジュ微分を考えると

$$\frac{D}{Dt}(d\boldsymbol{r}) = \frac{D\boldsymbol{r}_1}{Dt} - \frac{D\boldsymbol{r}_2}{Dt} = \boldsymbol{u}_1 - \boldsymbol{u}_2 = d\boldsymbol{u}$$

と表せるので

$$\begin{aligned}\frac{D\Gamma}{Dt} &= \oint_C \frac{D\boldsymbol{u}}{Dt} \cdot d\boldsymbol{r} + \oint_C \boldsymbol{u} \cdot d\boldsymbol{u} \\ &= \oint_C \frac{D\boldsymbol{u}}{Dt} \cdot d\boldsymbol{r} + \oint_C \frac{1}{2} d|\boldsymbol{u}|^2\end{aligned}$$

$$= \oint_C \frac{D\boldsymbol{u}}{Dt} \cdot d\boldsymbol{r} \tag{10}$$

を得る[1]．これに (2) の右辺を代入すると

$$\frac{d\Gamma}{dt} = \oint_C \left[-\frac{1}{\rho}\boldsymbol{\nabla} p + \nu \boldsymbol{\nabla}^2 \boldsymbol{u} + \frac{\nu}{3}\boldsymbol{\nabla}(\boldsymbol{\nabla}\cdot\boldsymbol{u}) \right] \cdot d\boldsymbol{r}$$
$$= -\oint_C \frac{1}{\rho}\boldsymbol{\nabla} p \cdot d\boldsymbol{r} + \nu \oint_C \boldsymbol{\nabla}^2 \boldsymbol{u} \cdot d\boldsymbol{r}. \tag{11}$$

ここで右辺第 1 項にストークスの定理を使い，第 2 項には $\boldsymbol{\nabla}^2\boldsymbol{u} = \boldsymbol{\nabla}(\boldsymbol{\nabla}\cdot\boldsymbol{u}) - \boldsymbol{\nabla}\times\boldsymbol{\omega}$ の関係式を使うと

$$\frac{D\Gamma}{Dt} = \iint_S \frac{\boldsymbol{\nabla}\rho \times \boldsymbol{\nabla} p}{\rho^2} \cdot \boldsymbol{n}\, dS - \nu \oint_C (\boldsymbol{\nabla}\times\boldsymbol{\omega}) \cdot d\boldsymbol{r} \tag{12}$$

が得られる[3]．この式から分かることは (i) 流体がバロトロピー流であり，かつ (ii) 非粘性の場合，循環 Γ は流れ（フロー）に沿って変化しない不変量となるということである．この流れに沿っての不変量という考え方は流体力学や力学系に特有の考え方であろう．

これまでの話では外力は 0 であると仮定してきた．もし外力 $\boldsymbol{K}$ が存在する場合であっても，それがあるポテンシャル関数 Ω を使って $K = -\boldsymbol{\nabla}\Omega$ と書き表されるような保存力である場合には C に沿っての線積分は 0 になってしまい循環には寄与しないことが分かる．従って以上をまとめると「保存力場にある完全流体がバロトロピー流である場合に循環は流れに沿って保存する」ということが結論できる．これを**ケルヴィンの循環定理**という．

3. 渦運動のパースペクティブ

トポロジーという大域幾何学的な問題を考えるにはやはり「遠くから眺めた場合にどのように見えるか？」といった視点が大切であろう．そこで渦度がある小さい領域に制限されていると仮定し，それを遠方から見た場合にどのようなことが観察できるのかを考えてみたいと思う．

最初に渦度場が与えられたときにそれから速度場を決定する方法について復習しておく．今，速度場 $\boldsymbol{u}(\boldsymbol{x},t)$ に対応するベクトルポテンシャルを $\boldsymbol{A}(\boldsymbol{x},t)$ として，$\boldsymbol{A}$ はソレノイダル条件を満たすとすると

$$\boldsymbol{u} = \boldsymbol{\nabla}\times\boldsymbol{A}, \quad \boldsymbol{\nabla}\cdot\boldsymbol{A} = 0 \tag{13}$$

となる．これより

$$\boldsymbol{\omega} = \boldsymbol{\nabla}\times\boldsymbol{\nabla}\times\boldsymbol{A} = -\boldsymbol{\nabla}^2\boldsymbol{A} \tag{14}$$

が得られる．このポアソン方程式の解は 3 次元のグリーン関数 $G(\boldsymbol{x},\boldsymbol{x}') = \dfrac{1}{4\pi|\boldsymbol{x}-\boldsymbol{x}'|}$ を用いて

$$\boldsymbol{A}(\boldsymbol{x}) = \frac{1}{4\pi}\int \frac{\boldsymbol{\omega}(\boldsymbol{x}')}{|\boldsymbol{x}-\boldsymbol{x}'|} dV' \tag{15}$$

と書ける（ただし調和関数分の不定性は除いた)．上式を (13) の第 1 式に代入して

$$\boldsymbol{u}(\boldsymbol{x}) = -\frac{1}{4\pi}\int \boldsymbol{\omega}(\boldsymbol{x}') \times \boldsymbol{\nabla}\left(\frac{1}{|\boldsymbol{x}-\boldsymbol{x}'|}\right) dV'$$
$$= \frac{1}{4\pi}\int \frac{\boldsymbol{\omega}(\boldsymbol{x}')\times(\boldsymbol{x}-\boldsymbol{x}')}{|\boldsymbol{x}-\boldsymbol{x}'|^3} dV' \tag{16}$$

を得る．これがビオ・サヴァールの法則と呼ばれるものであり回転という演算の逆演算であると考えられる．ビオ・サヴァールの法則は電磁気学でもおなじみのものであり，定常な電流を $\boldsymbol{j}$，それによって誘起される磁場を $\boldsymbol{B}$ とするとそれらは速度 $\boldsymbol{u}$，渦度 $\boldsymbol{\omega}$ との間に $\boldsymbol{j}\leftrightarrow\boldsymbol{\omega}$, $\boldsymbol{B}\leftrightarrow\boldsymbol{u}$ の対応関係を持っている[4]．この電磁気学との対応関係を用いることによって渦運動についていくつかの有用な情報を引き出すことができる．その一つが以下に見るようなベクトルポテンシャルの多重極展開の応用である．

今，渦度がある有限の領域に局在しているコンパクトな場合を考えよう．式で表すとある実数 R が存在して，渦度 $\boldsymbol{\omega}(\boldsymbol{x},t)$ は

$$|\boldsymbol{\omega}(\boldsymbol{x},t)|e^{r/R} \to 0 \quad \text{as} \quad r = |\boldsymbol{x}| \to \infty$$

を満たすとする．すなわち渦度は原点を中心とする半径 R の球の外側では指数関数的に減少すると仮定する．このような場合，ベクトルポテンシャルの評価式 (15) で最大の寄与をするのは $|\boldsymbol{x}'| < R$ であり，関数 $\frac{1}{|\boldsymbol{x}-\boldsymbol{x}'|}$ は $r = |\boldsymbol{x}|$ として次のようにテイラー展開することができると考えられる．

$$\frac{1}{|\boldsymbol{x}-\boldsymbol{x}'|}=\frac{1}{r}-(\boldsymbol{x}'\cdot\nabla)\frac{1}{r}+\frac{1}{2}(\boldsymbol{x}'\cdot\nabla)^2\frac{1}{r}-\cdots. \tag{17}$$

これを (15) に代入して最初の 2 項を取ると

$$\boldsymbol{A}(\boldsymbol{x})\sim\frac{1}{4\pi r}\int\boldsymbol{\omega}(\boldsymbol{x}')dV' -\frac{1}{4\pi}\int\boldsymbol{\omega}(\boldsymbol{x}')(\boldsymbol{x}'\cdot\nabla)\frac{1}{r}dV' \tag{18}$$

が得られる．

渦度が $\nabla\cdot\boldsymbol{\omega}=0,\quad |\boldsymbol{\omega}|=\mathcal{O}(e^{-r/R})\quad (r\to\infty)$ を満たすことに注意し，第 1 項を成分で書くと次の関係式を満たす（同じ添字については和を取るというアインシュタインの規則を使う）．

$$\int\omega_i' dV'=\int\frac{\partial}{\partial x_j'}(\omega_j' x_i')dV' =\int_{S_\infty}n_j\omega_j' x_i' dS'=0. \tag{19}$$

ここで最初の等号には $\omega_i'=\delta_{ij}\omega_j'+x_i'\left(\frac{\partial\omega_j'}{\partial x_j'}\right)$ の関係式を，2 番目の等号にはガウスの発散定理を使った（S_∞ は充分に遠方での閉曲面を意味している）．仮定より充分に遠方では渦度の大きさは 0 であるので，最後の面積分は 0 となる．

式 (18) の第 2 項の計算には少し工夫が必要である．まず $\nabla\left(\frac{1}{r}\right)=\frac{\boldsymbol{x}}{r^3}$ に注意し，$\omega_i(\boldsymbol{x}')=\omega_i'$ と書くことにすると第 2 項の i 成分は

$$-\frac{1}{4\pi r^3}\int\omega_i'(x_j' x_j)dV' \tag{20}$$

と書ける．ここでベクトル解析の公式 $\boldsymbol{x}\times(\boldsymbol{\omega}'\times\boldsymbol{x}')=(\boldsymbol{x}\cdot\boldsymbol{x}')\boldsymbol{\omega}'-(\boldsymbol{x}\cdot\boldsymbol{\omega}')\boldsymbol{x}'$ を利用する．この公式の右辺の符号が+になった式については成分表示で次の関係が成り立つことが分かる．

$$(x_j x_j')\omega_i'+(x_j\omega_j')x_i'=x_j(x_j'\omega_i'+\omega_j' x_i') =x_j\frac{\partial}{\partial x_k'}(x_i' x_j'\omega_k')=\frac{\partial}{\partial x_k'}(x_j x_i' x_j'\omega_k'). \tag{21}$$

よってガウスの発散定理より，コンパクトな渦度場については

$$\int\{(x_j x_j')\omega_i'+(x_j\omega_j')x_i'\}dV' =\int_{S_\infty}n_k x_j x_i' x_j'\omega_k' dS'=0 \tag{22}$$

が成り立つ．この関係式を使うと $(\boldsymbol{x}\cdot\boldsymbol{x}')\boldsymbol{\omega}'=\frac{1}{2}\boldsymbol{x}\times(\boldsymbol{\omega}'\times\boldsymbol{x}')$ となることが分かって，結局第 2 項は

$$-\frac{1}{4\pi}\int\boldsymbol{\omega}(\boldsymbol{x}')(\boldsymbol{x}'\cdot\nabla)\frac{1}{r}dV' =\frac{\boldsymbol{x}}{8\pi r^3}\times\int\boldsymbol{x}'\times\boldsymbol{\omega}' dV' \tag{23}$$

となることが分かる．

ここでこのコンパクトな渦度場に付随する積分量として次のようなダイポールモーメントを定義する．

$$\boldsymbol{\mu}=\frac{1}{2}\int\boldsymbol{x}'\times\boldsymbol{\omega}' dV'. \tag{24}$$

するとベクトルポテンシャルの主要項は $\boldsymbol{A}\sim\frac{\boldsymbol{x}}{4\pi r^3}\times\boldsymbol{\mu}$ となり，速度場の表現として

$$\boldsymbol{u}(\boldsymbol{x})=\nabla\times\boldsymbol{A}=\frac{1}{4\pi r^3}(\boldsymbol{\mu}-3\boldsymbol{n}(\boldsymbol{n}\cdot\boldsymbol{\mu})) \tag{25}$$

が得られる[5)]．ただし $\boldsymbol{n}$ は $\boldsymbol{x}$ 方向の単位ベクトルを表す．以上をまとめるとコンパクトな渦度場は充分遠方においてはその細かい構造や運動に依らずダイポール場として近似できることが結論できる（図 1 参照）．

式 (25) から分かるのは渦度場がコンパクトであってもそれが誘起する速度場は $\mathcal{O}(r^{-3})$ で無限に広がっていることである．それでも運動エネルギー $K=\frac{1}{2}\int|\boldsymbol{u}|^2\,dV$ は $|\boldsymbol{u}|^2=\mathcal{O}(r^{-6})$ であ

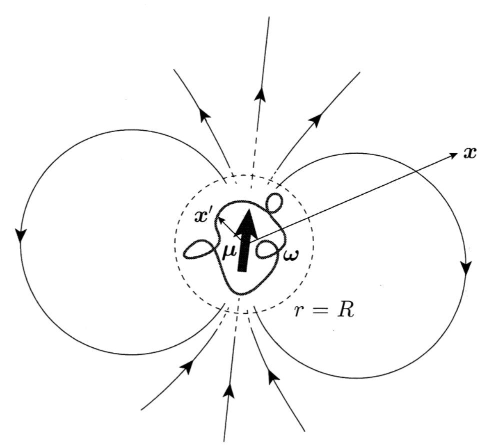


図 1　コンパクトな渦度場は充分遠方ではダイポール場として近似できる．

り，収束する．詳しい議論は省略するが外力がない場合の運動エネルギー $K = \frac{1}{2}\int |\boldsymbol{u}|^2\, dV$ の時間微分を求めると

$$\frac{dK}{dt} = -\nu \int |\boldsymbol{\omega}|^2\, dV \tag{26}$$

という関係式が求まり，$\nu = 0$ で K は保存量であることが分かる．

4. 渦管の絡み合いとヘリシティ

これまでコンパクトな渦度場の作る遠方場について考えてきたが，今度はもう少し渦度場に近づいて流れ場のトポロジーを考えることにしよう．ここで注目するのは次のような**ヘリシティ**と呼ばれる空間積分である．

$$\mathcal{H} = \int \boldsymbol{u}\cdot\boldsymbol{\omega}\, dV. \tag{27}$$

ここで積分は全空間にわたるものとし，渦度場は前と同じようにコンパクトであるとする．ヘリシティの時間変化を見るために外力のない縮まない流体を考えて速度と渦度の方程式を次のように用意する．

$$\frac{D\boldsymbol{u}}{Dt} = -\frac{1}{\rho}\boldsymbol{\nabla} p - \nu(\boldsymbol{\nabla}\times\boldsymbol{\omega}), \tag{28}$$

$$\frac{D\boldsymbol{\omega}}{Dt} = \boldsymbol{\omega}\cdot\boldsymbol{\nabla}\boldsymbol{u} - \nu\left(\boldsymbol{\nabla}\times(\boldsymbol{\nabla}\times\boldsymbol{\omega})\right). \tag{29}$$

ここで (28) はナヴィエ・ストークス方程式 (2) の粘性項にベクトル解析の公式 $\boldsymbol{\nabla}\times\boldsymbol{\nabla}\times\boldsymbol{u} = \boldsymbol{\nabla}(\boldsymbol{\nabla}\cdot\boldsymbol{u}) - \boldsymbol{\nabla}^2\boldsymbol{u}$ から得られる関係式 $\boldsymbol{\nabla}^2\boldsymbol{u} = -\boldsymbol{\nabla}\times\boldsymbol{\omega}$ を代入したものである．式 (27) より

$$\frac{d\mathcal{H}}{dt} = \int\left(\boldsymbol{\omega}\cdot\frac{D\boldsymbol{u}}{Dt} + \boldsymbol{u}\cdot\frac{D\boldsymbol{\omega}}{Dt}\right)dV \tag{30}$$

であり，この式に (28) と (29) を代入し，部分積分をすると次の関係式が得られる．

$$\frac{d\mathcal{H}}{dt} = \int_{S_\infty} \boldsymbol{n}\cdot\boldsymbol{\Phi}\, dS - 2\nu\int(\boldsymbol{\omega}\cdot\boldsymbol{\nabla}\times\boldsymbol{\omega})dV. \tag{31}$$

ここで $\boldsymbol{\Phi}$ はヘリシティのフラックスであり，次のような式で与えられる．

$$\boldsymbol{\Phi} = \boldsymbol{\omega}\left(-\frac{p}{\rho} + \frac{1}{2}|\boldsymbol{u}|^2\right) + \nu\, \boldsymbol{u}\times(\boldsymbol{\nabla}\times\boldsymbol{\omega}). \tag{32}$$

式 (31) において渦度場がコンパクトであることを考えると右辺の最初の面積分は消えてヘリシティの時間微分は

$$\frac{d\mathcal{H}}{dt} = -2\nu\int(\boldsymbol{\omega}\cdot\boldsymbol{\nabla}\times\boldsymbol{\omega})dV \tag{33}$$

となる．この式が示すように非粘性 ($\nu = 0$) であるならばヘリシティは保存することが分かる．ここで注意したいのは上式右辺の積分は渦度 $\boldsymbol{\omega}$ と渦度の回転 $\boldsymbol{\nabla}\times\boldsymbol{\omega}$（これはダイボーティシティと呼ばれる）の幾何学的な関係によって正，負いずれの値も取り得るということである．これはヘリシティという積分量の特徴であり，運動エネルギーなどが正定値であることと大きな違いであると言えよう．

さらに (32) を見ると粘性がない場合，フラックス $\boldsymbol{\Phi}$ は渦度 $\boldsymbol{\omega}$ と平行である．従って，もし (31) において領域の境界面の法線ベクトル $\boldsymbol{n}$ が渦度 $\boldsymbol{\omega}$ と垂直となるならば，境界を遠方に取らなくてもフラックスの面積分は 0 となりその領域内のヘリシティは保存することが分かる．

そのような境界の一つの例として渦管というものを考えよう．渦度ベクトルを連続的に空間的につなげていったものは渦線と呼ばれるが，渦管とはある空間内の閉曲線上の各点における渦線を束にしたものである．渦管の境界は常に渦度に沿っており，その法線は必ず渦度と垂直になっていることが分かる．

今，渦管の両端が閉じて渦輪を作っている場合を考えよう．最も簡単な場合として渦度が 3 次元極座標 (r, θ, ϕ) で

$$\boldsymbol{\omega} = (0, 0, \omega(r, \theta)) \tag{34}$$

で与えられるような軸対称な渦輪を考える．この渦度場に対応する速度場は

$$\boldsymbol{u} = (u(r,\theta), v(r,\theta), 0) \tag{35}$$

という成分を持つことが分かるが（実際この $\boldsymbol{u}$ に対して $\omega(r,\theta) = \frac{1}{r}\left\{\frac{1}{\sin\theta}\frac{\partial(vr)}{\partial r} - \frac{\partial u}{\partial\theta}\right\}$ となる），

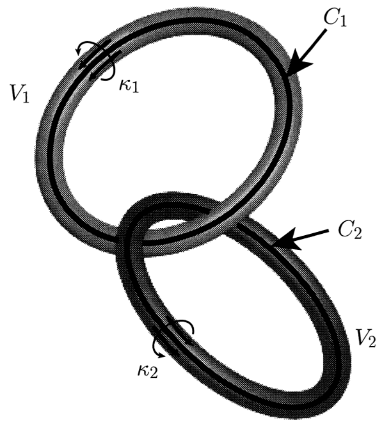


図２　２つの円形渦輪 V_1, V_2 が絡み合った状態．閉曲線 C_1 が C_2 を外縁とする曲面 S_2 を，閉曲線 C_2 が C_1 を外縁とする曲面 S_1 をそれぞれ貫いていることが分かる．

渦度は ϕ 方向で速度は (r, θ) 面内であるので，$\boldsymbol{u} \cdot \boldsymbol{\omega} = 0$，すなわちヘリシティは0となる．さてここで図２のようにそれぞれ中心線を C_1, C_2 とする２つの円形渦輪 V_1, V_2 が絡み合っている場合のヘリシティを Moffatt の論文[6]に沿って考えることにしよう．V_1, V_2 の断面積 σ_1, σ_2 は小さく，渦度は渦輪付近に集中しているとしよう．

全体の渦度は V_1 の渦度 $\boldsymbol{\omega}_1$ と V_2 の渦度 $\boldsymbol{\omega}_2$ の和となる．

$$\boldsymbol{\omega}(\boldsymbol{x}) = \boldsymbol{\omega}_1(\boldsymbol{x}) + \boldsymbol{\omega}_2(\boldsymbol{x}). \tag{36}$$

一方 V_1, V_2 が誘起する速度場を $\boldsymbol{u}_1(\boldsymbol{x}), \boldsymbol{u}_2(\boldsymbol{x})$，すなわち $\boldsymbol{\nabla} \times \boldsymbol{u}_1 = \boldsymbol{\omega}_1, \boldsymbol{\nabla} \times \boldsymbol{u}_2 = \boldsymbol{\omega}_2$，とすると全体の速度場は

$$\boldsymbol{u}(\boldsymbol{x}) = \boldsymbol{u}_1(\boldsymbol{x}) + \boldsymbol{u}_2(\boldsymbol{x}) \tag{37}$$

となる．先の議論より

$$\int \boldsymbol{u}_1 \cdot \boldsymbol{\omega}_1 \, dV = \int \boldsymbol{u}_2 \cdot \boldsymbol{\omega}_2 \, dV = 0 \tag{38}$$

となるので，ヘリシティは

$$\mathcal{H} = \int_{V_2} \boldsymbol{u}_1 \cdot \boldsymbol{\omega}_2 dV + \int_{V_1} \boldsymbol{u}_2 \cdot \boldsymbol{\omega}_1 dV \tag{39}$$

で与えられる．まず右辺最初の積分について考えよう．体積要素 dV を C_2 方向の線素 dx と面素 $d\sigma$ を使って $dV = d\sigma dx$ とおく．断面積 σ_2 は小さいと仮定しているので，速度 $\boldsymbol{u}_1$ は σ_2 にわたってほぼ一定であると考えられる．また V_2 の循環を κ_2, C_2 の接線ベクトルを $\boldsymbol{t}_2$ とすると

$$\int_{\sigma_2} \boldsymbol{\omega}_2 \, d\sigma = \kappa_2 \boldsymbol{t}_2 \tag{40}$$

という関係がある．これらを最初の積分に代入すると

$$\begin{aligned}
\int_{V_2} \boldsymbol{u}_1 \cdot \boldsymbol{\omega}_2 dV &= \int_{C_2} \int_{\sigma_2} \boldsymbol{u}_1 \cdot \boldsymbol{\omega}_2 \, d\sigma dx \\
&= \int_{C_2} \boldsymbol{u}_1 \cdot \left(\int_{\sigma_2} \boldsymbol{\omega}_2 \, d\sigma \right) dx \\
&= \kappa_2 \oint_{C_2} \boldsymbol{u}_1 \cdot \boldsymbol{t}_2 dx \\
&= \kappa_2 \oint_{C_2} \boldsymbol{u}_1 \cdot d\boldsymbol{x}_2
\end{aligned} \tag{41}$$

が得られる．最後の式にストークスの定理を使うと

$$\kappa_2 \oint_{C_2} \boldsymbol{u}_1 \cdot d\boldsymbol{x}_2 = \kappa_2 \int_{S_2} \boldsymbol{\omega}_1 \cdot \boldsymbol{n} \, dS \tag{42}$$

となるが，ここで S_2 は閉曲線 C_2 を外縁とする曲面，$\boldsymbol{n}$ は S_2 の法線ベクトルである．上式右辺の積分は曲面 S_2 を貫く渦度 $\boldsymbol{\omega}_1$ の総量，すなわち循環を表しており，その値は今のように２つの渦輪が絡み合っている場合には $\pm\kappa_1$（正負は交点の符号による），また絡み合っていないときには0となる．$\displaystyle\int_{V_1} \boldsymbol{u}_2 \cdot \boldsymbol{\omega}_1 \, dV$ についても全く同じ議論が成り立つので，次の結論を得る．

$$\mathcal{H} = \begin{cases} 0 & V_1, V_2 \text{ が絡まっていないとき} \\ \pm 2\kappa_1\kappa_2 & V_1, V_2 \text{ が絡まっているとき.} \end{cases}$$

このように渦輪のヘリシティは渦輪の絡み合いの度合いを示すトポロジカルな量であることが分かる．粘性の値がゼロのときヘリシティは保存するので渦輪の絡み合いの度合いも変化しないトポロジカルな保存量であることが結論できる．

5. 粘性の働き

粘性がない場合，ヘリシティはトポロジカルな保存量であることを見たが，粘性の値がゼロでない場合には状況は一変し，複数の渦管はつなぎ替

え（リコネクション）を起こすようになる（逆に言うと粘性がないとき，渦管はつなぎ替えを起こさないのである）．問題なのは粘性の値がゼロに近づいた極限であろう．すなわち粘性 $\nu \to 0$ の極限で渦管のリコネクションは生き残るのか，それとも絡み合いが保存される状況に近づくのか．これは現在でも解明されていない流体力学の大問題である．

この問題の難しさはナヴィエ・ストークス方程式において ν が最高階の微分項（$\boldsymbol{\nabla}^2\boldsymbol{u}$）の係数であり，$\nu \to 0$ の極限を考えることがいわゆる特異摂動の問題になっていることによる．一般に方程式の解の構造や性質は最高階の微分項によって決定されることが多く，その係数をゼロに近づけると解が定性的な変化をする可能性が高くなるのである．流れの性質を決める無次元量としてレイノルズ数 $Re = UL/\nu$ が良く知られている（U, L は流れの代表的な速度と長さを表している）．$\nu \to 0$ という状態は $Re \to \infty$ に対応しており，これは流れが乱流状態にあることを意味している．$\nu \to 0$ における流れのトポロジーの問題が難しいのは乱流の問題の難しいこと相通じていると言うことができるであろう．

長い流体力学の歴史においてトポロジーという視点がクローズアップされたのは最近のことであり，現在でも活発に研究が行われている．その活動の一つの例としてはイギリスのケンブリッジにあるアイザック・ニュートン研究所（Isaac Newton Institute for Mathematical Sciences）で2012年後半に開催されたプログラム「Topological Dynamics in the Physical and Biological Sciences」（http://www.newton.ac.uk/programmes/TOD/index.html）が挙げられる．そこでは流体のみならず物理や生物における様々なトポロジーに関する問題が議論され成果が発表されている[7]．

本稿はこのニュートン研究所でのプログラムでケンブリッジに滞在中にH.K. Moffatt教授（Cambridge大学）と行った議論および共同研究がそのたたき台になっている．特にダイポールやヘリシティに関する議論はMoffatt教授がフランスのエコールポリテクニクで行った講義の講義録を参考にしたものである．また，本稿をまとめるに当たって本研究科の森吉仁志教授にアドバイスを頂いた．感謝の意を表したい．

参考文献

1) 今井 功，『流体力学（前編）』裳華房 (1976).
2) 巽 友正，『流体力学』培風館 (1980).
3) J. Pedlosky, *Geophysical Fluid Dynamics*, 2nd Edition, Springer-Verlag (1986).
4) 細野 忍，電磁気学，流体力学とベクトル解析，「数理科学」2014年8月号，46–51.
5) J.D. Jackson, *Classical Electrodynamics*, 3rd Edition, John Wiley & Sons, INC (1998).
6) H.K. Moffatt, The degree of knottiness of tangled vortex lines, *J. of Fluid Mech.* **35** 117–129 (1969).
7) H.K. Moffatt, K. Bajer & Y. Kimura, Topological Fluid Dynamics: Theory and Applications. *Procedia IUTAM*, Vol.**7**, 1–260 (2013).

（きむら・よしふみ，名古屋大学大学院多元数理科学研究科）

トポロジーとゲージ理論

ヒッグス場のトポロジー

伊藤 克司

1. はじめに

トポロジーは，ゲージ理論を理解するための重要な数学的手段である．本記事ではいくつかのトポロジーにおける概念（ホモトピー群，特性類，K理論）を取り上げ，それがゲージ理論や超弦理論においてどのように現れ，役立っているかを説明する[1)]．

2. ホモトピー群とゲージ理論

空間 M の中に閉じた曲線を描き，それを連続的に変形することを考える．2つの閉曲線について，一方から他方へ連続的に変形できるとき，2つの閉曲線はホモトープであるという．ホモトープは同値関係であり，ある閉曲線の同値類をその閉曲線の**ホモトピー類**という．

円周 S^1 から M への写像のホモトピー類を $\pi_1(M)$ と表す．例えば $M = S^1$ の場合，$\pi_1(M)$ は S^1 が M に（向きも含めて）何回巻き付いているかによって分類され，加群 $\mathbb{Z}$ と同じ構造をもっている．$\pi_1(M)$ は1次ホモトピー群あるいは基本群とも呼ばれる．k 次元球面 S^k から M への写像のホモトピー群 $\pi_k(M)$ も同様に定義される．

ゲージ場とヒッグス場からなるゲージ理論を考えよう．ヒッグス場のポテンシャルが最小になるようなヒッグス場の配位空間のトポロジーが興味の対象となる．その研究は，摂動論を超えた物理の探求に不可欠である．以下具体的な模型に基づいてホモトピー群がどのように現れるかを見ていこう．

2.1 ボーテックス

$d = 3+1$ 次元の時空上の $U(1)$ ゲージ場 $A_\mu(x)$ $(\mu = 0, 1, 2, 3)$ と複素スカラー場 $\phi(x)$ が結合しているアーベリアンヒッグス模型を考えよう．そのラグランジアン（密度）は

$$\mathcal{L} = -\frac{1}{4}F_{\mu\nu}F^{\mu\nu} + (D_\mu\phi)^*(D^\mu\phi) - V(\phi) \quad (1)$$

で与えられる．ここで

$$F_{\mu\nu} = \partial_\mu A_\nu - \partial_\nu A_\mu$$

は場の強さテンソル，$D_\mu = \partial_\mu - eA_\mu$ は共変微分（e は電荷）であり，ポテンシャル $V(\phi)$ は

$$V(\phi) = \frac{\lambda}{4}\left(|\phi|^2 - \frac{v^2}{2}\right)^2 \quad (2)$$

で与えられる（図1）．ここで v, λ は正の実数とする．ラグランジアン (1) はゲージ変換

$$A_\mu(x) \to A_\mu(x) + \frac{1}{e}\partial_\mu\alpha(x),$$

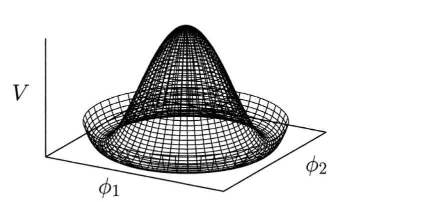


図1 スカラー場のポテンシャル．

$$\phi(x) \to e^{i\alpha(x)}\phi(x)$$

の下で不変である．ポテンシャル (2) を最小にする ϕ は

$$|\phi| = \frac{v}{\sqrt{2}} \tag{3}$$

で与えられる．これは半径 $\frac{v}{\sqrt{2}}$ の円周を表す．

自発的に真空が破れ，スカラー場 ϕ の真空期待値がある円周上の 1 点，例えば

$$\langle\phi\rangle = \frac{v}{\sqrt{2}} \tag{4}$$

になったとすると，$U(1)$ ゲージ対称性は破れる．摂動論的真空 (4) からのスカラー場の揺らぎ ϕ' を

$$\phi = \frac{v}{\sqrt{2}} + \phi'$$

で定義すると，ϕ' は質量 $m_S = \sqrt{\lambda}v$，ゲージ場は質量 $m_V = ev$ を獲得する．これはヒッグス機構と呼ばれ，摂動論的真空 (4) からの励起状態の質量スペクトルをうまく説明することができる．

この理論には，この摂動論的真空だけではなくトポロジカルに非自明な古典解がある．z 軸方向に一様に分布し，安定で有限のエネルギーをもつ，時間に依存しない場の古典解（ソリトン解あるいは lump 解と呼ばれる）を調べよう．エネルギーは

$$E = \int d^2x \Big[\frac{1}{2}(E^iE^i + B^iB^i + \Pi_0^*\Pi_0 + (D_i\phi)^*(D_i\phi)) + V(\phi)\Big]$$

で与えられる．ここで $E^i = F^{i0}$ は電場，$B^i = \frac{1}{2}\epsilon^{ijk}F^{jk}$ は磁場，$\Pi_0 = (D_0\phi)^*$ は ϕ の共役運動量である．この値を有限にするためには，まず z 軸からの距離 $\rho \to \infty$ のときポテンシャル項がゼロでなければならない．そこで $\phi(x)$ は 2 次元極座標 (ρ, θ) で

$$\phi(\rho,\theta) \to \frac{v}{\sqrt{2}}e^{i\sigma(\theta)} \quad (\rho \to \infty)$$

と振る舞うことになる．ゲージ場は ϕ の運動項を有限にするために

$$A_\theta \to \frac{1}{e\rho}\frac{d\sigma}{d\theta} \quad (\rho \to \infty)$$

と振る舞う．この境界条件をみたす解は Abrikosov–Nielsen–Olesen 渦（ボーテックス）解と呼ばれる．その性質は無限遠における円周 S^1 からスカラー場の真空 S^1 への写像 $\sigma(\theta)$ の巻き付き数

$$n = \frac{1}{2\pi}(\sigma(2\pi) - \sigma(0))$$

で特徴付けられる．巻き付き数は整数であり，エネルギーの有限性を変えないような連続的変換では変化しない．ボーテックス解はこうして 1 次ホモトピー群 $\pi_1(S^1)$ で分類される．この理論は超伝導中に生じる電磁場の到達距離が有限になる現象や渦糸の有効模型として導入された．

2.2 モノポール

高次ホモトピー群が現れる例としてモノポール[2)]やインスタントンと呼ばれるソリトン解がある．はじめにモノポールを考えよう．$d = 3+1$ 次元における $SU(2)$ ゲージ場 $A^a_\mu(x)$ ($\mu = 0,1,2,3$, $a = 1,2,3$) と $SU(2)$ の随伴表現に属するスカラー場 $\phi^a(x)$ を導入し，そのラグランジアンが

$$\mathcal{L} = -\frac{1}{4}F^a_{\mu\nu}F^{a\mu\nu} + \frac{1}{2}(D_\mu\phi)^a(D^\mu\phi)^a - \frac{\lambda}{4}\left(\phi^a\phi^a - v^2\right)^2 \tag{5}$$

で与えられる模型を考える．ここで

$$(D_\mu\phi)^a = \partial_\mu\phi^a + g\epsilon^{abc}A^b_\mu\phi^c,$$
$$F^a_{\mu\nu} = \partial_\mu A^a_\nu - \partial_\nu A^a_\mu + g\epsilon^{abc}A^b_\mu A^c_\nu$$

である．g は結合定数，ϵ^{abc} は完全反対称記号である．この模型の真空は 2 次元球面 S^2

$$\phi^a\phi^a = v^2 \tag{6}$$

であり，スカラー場の真空期待値を

$$\langle\phi^1\rangle = \langle\phi^2\rangle = 0, \quad \langle\phi^3\rangle = v$$

と選ぶと，ϕ^3 の真空からの揺らぎを表す場は質量 $\sqrt{2\lambda}v$ をもち，さらにゲージ場 A^1_μ, A^2_μ は質量 gv をヒッグス機構により獲得する．A^3_μ は零質量のゲージ場のままである．

ボーテックスの場合と同様に，エネルギーを有限にする静的なスカラー場の配位は，$r = |\boldsymbol{x}| \to \infty$

で真空 (6) に行く必要がある．これは無限遠の 2 次元球面 S^2_∞ から真空の配位空間 S^2 への連続写像を与える．この巻き付き数は

$$Q = \frac{1}{8\pi}\int_{S^2_\infty} \epsilon^{abc}\hat{\phi}^a d\hat{\phi}^b \wedge d\hat{\phi}^c, \quad \hat{\phi}^a = \frac{\phi^a}{|\phi|} \quad (7)$$

で与えられる．残った $U(1)$ ゲージ場は，磁荷 Q をもつ配位（モノポール解）となっている．この解を 't Hooft–Polyakov モノポールという．このようにモノポール解は $\pi_2(S^2)$ で分類される．モノポール解はこのようなゲージヒッグス模型では必然的に生じ得るソリトン解であり，電荷の量子化や電磁双対性の理解の基礎となるものである．

2.3 インスタントン

4 次元 Euclid 空間上の $SU(2)$ Yang–Mills 理論を考える．その作用は，ラグランジアン (5) の一項目を取り出し，ゲージ場の 2×2 行列による表示 $A_\mu = \frac{\tau^a}{2}A^a_\mu$ に移行し（τ^a は Pauli 行列），さらに $A_\mu \to gA_\mu$ とスケール変換することにより

$$S = \frac{1}{2g^2}\int d^4x \ \mathrm{tr}\ F_{\mu\nu}F^{\mu\nu}$$

となる．ここで

$$F_{\mu\nu} = \partial_\mu A_\nu - \partial_\nu A_\mu - i[A_\mu, A_\nu]$$

であり，運動方程式は

$$D_\mu F^{\mu\nu} = \partial_\mu F^{\mu\nu} - i[A_\mu, F^{\mu\nu}] = 0$$

となる．運動方程式をみたし，作用を極小にする解は 4 次元 Euclid 空間の無限遠 $r = (\sum_{\mu=1}^4 x_\mu^2)^{1/2} \to \infty$ において，曲率が $F_{\mu\nu} = 0$ となっていること，つまりゲージ場が

$$A_\mu \to iU^{-1}(x)\partial_\mu U(x) \quad (r \to \infty)$$

の形になっていればよい．ここで $U(x)$ は $SU(2)$ に値をもつゲージ変換の変換関数であり，x は無限遠の 3 次元球面 S^3_∞ の座標である．一方で作用は，$F_{\mu\nu}$ の双対テンソル $*F_{\mu\nu} = \frac{1}{2}\epsilon_{\mu\nu\rho\sigma}F^{\rho\sigma}$ を用いて（$\epsilon_{\mu\nu\rho\sigma}$ は完全反対称記号）

$$S = \frac{1}{4g^2}\int d^4x \ \mathrm{tr}(F_{\mu\nu} \mp *F_{\mu\nu})^2 \pm 2\mathrm{tr}\ F_{\mu\nu} * F^{\mu\nu}$$

と平方完成できる．ここで積分の第 2 項は

$$\frac{1}{2g^2}\int d^4x \ \mathrm{tr}\ F_{\mu\nu} * F^{\mu\nu} = \int d^4x \ \mathrm{tr}\ \partial_\mu \left(A_\nu F_{\rho\sigma} + \frac{2i}{3}A_\nu A_\rho A_\sigma\right)\epsilon^{\mu\nu\rho\sigma} \quad (8)$$

と全微分の形になり，3 次元球面 S^3_∞ 上での積分値は S^3_∞ から $SU(2)$ への写像 $U(x)$ の巻き付き数（インスタントン数あるいは Pontryagin 数と呼ばれる）

$$k = \frac{1}{24\pi^2}\int_{S^3_\infty} dS_\mu \epsilon^{\mu\nu\rho\sigma}\ \mathrm{tr}(\partial_\nu UU^{-1}\partial_\rho UU^{-1} \times \partial_\sigma UU^{-1})$$

を用いて表すことができる．作用は

$$S \geq \frac{8\pi^2}{g^2}|k|$$

と評価される．従って作用が極小値をとるようなゲージ場の配位は（反）自己双対方程式

$$F_{\mu\nu} = \pm * F_{\mu\nu}$$

をみたす．このとき Bianchi 恒等式 $D_\mu * F^{\mu\nu} = 0$ により，運動方程式もみたされる．この（反）自己双対方程式の解はインスタントンと呼ばれ，ゲージ理論の異なる真空をつなぐ非摂動効果を表している．インスタントンは 3 次ホモトピー群 $\pi_3(SU(2)) \simeq \mathbb{Z}$ で分類される．

このようにゲージ理論において，非自明な真空を記述する場の配位のトポロジーは，ホモトピー群で分類される．ただし，これは古典的なレベルの話である．量子論ではトポロジーはどのように現れるのであろうか．

3. 特性類，指数定理とアノマリー

3.1 特性類

インスタントン数を導く，ゲージ場 A の曲率（場の強さテンソル）は

$$F = dA + A^2 = \frac{1}{2}F_{\mu\nu}dx^\mu \wedge dx^\nu,$$

$$A = A_\mu dx^\mu$$

と微分形式を用いて表される．よって，インスタントン数は

$$\int \mathrm{tr}\ F^2$$

の形に表すことができる．一般次元の時空上のゲージ理論（あるいはファイバー束）で同様なトポロジー不変量を構成するにはどうすればよいであろうか．

ゲージ群が $U(N)$ の場合 F は $N \times N$ 行列となる．F の特性多項式

$$\det\left(t + \frac{iF}{2\pi}\right) = t^N + c_1(F)t^{N-1} + \cdots + c_N(F)$$

を考えると，$c_j(F)$ は第 j Chern 形式と呼ばれ，

$$c_1(F) = \frac{i}{2\pi}\mathrm{tr}\ F,$$
$$c_2(F) = \frac{1}{8\pi^2}\left(\mathrm{tr}\ F^2 - (\mathrm{tr}\ F)^2\right), \cdots$$

等と表される．この Chern 形式の各項は閉形式つまり $dc_j(F) = 0$ であり，さらにその積分はゲージ場の連続変形に対して不変であることが示される．$c_j(F)$ を代表元とするコホモロジー類は第 j Chern 類と呼ばれ，Chern 類は複素ファイバー束の分類に重要な量である．

ゲージ群が $SU(2)$ の場合 F のトレースはゼロなので，第 2 Chern 形式 $c_2(F)$ の積分はまさにインスタントン数に対応している．

3.2 アノマリー

古典的な保存則が量子補正により破れる現象をアノマリー（量子異常）という[3]．4次元の $SU(N)$ ゲージ場 A_μ に N 種類の無質量の Dirac フェルミオン ψ が結合した系の経路積分

$$e^{-W[A]} = \int D\psi D\bar{\psi} \exp\left(-\int d^4x\ \bar{\psi} i\gamma^\mu D_\mu \psi\right)$$

を考える．$W[A]$ は A_μ の有効作用と呼ばれる．また $D_\mu = \partial_\mu - igA_\mu$ は共変微分，γ^μ は Dirac のガンマ行列である．フェルミオンのカイラリティ（左巻き，右巻き）を区別する γ_5 行列を $\gamma_5 = i\gamma^0\gamma^1\gamma^2\gamma^3$ で定義する．古典作用は大域的カイラル変換

$$\psi(x) \to e^{-i\gamma_5\alpha}\psi, \quad \bar{\psi}(x) \to \bar{\psi}(x)e^{-i\gamma_5\alpha}$$

の下で不変であり，Noether の定理によってカイラルカレント $J^5_\mu = i\bar{\psi}\gamma_\mu\gamma_5\psi$ は保存する．カレントの保存則を導くため，パラメータ α を時空座標に依存させると作用からは

$$\int d^4x\ \alpha(x)\partial^\mu J^5_\mu(x)$$

の項を出す．一方で経路積分の測度 $D\psi D\bar{\psi}$ はヤコビアン

$$\det(e^{2i\gamma_5\alpha}) = \exp\left(2i\int d^4x\ \alpha(x)\ \mathrm{tr}\ \gamma_5\right)$$

を生じる．この無限次元行列式をカイラル対称性を保ったまま正則化できない（カウンター項で消すことができない）ため保存則が破れる．藤川の方法[4]に従って，$\mathrm{tr}\ \gamma_5$ を熱核正則化を用いて評価すると，保存則の破れは

$$\partial^\mu J^5_\mu = \frac{1}{16\pi^2}\mathrm{tr}\ F_{\mu\nu} * F^{\mu\nu}$$

の形に表される．右辺に現れる量は第 2 Chern 2 形式であり，トポロジカル不変な量である．ここで

$$\mathrm{tr}\ \gamma_5 = n_+ - n_- = \frac{1}{16\pi^2}\int d^4x\ \mathrm{tr}\ F_{\mu\nu} * F^{\mu\nu}$$

は Dirac 演算子 $\gamma^\mu D_\mu$ の左巻きゼロ固有値モードと右巻きゼロ固有値モードの差を表し，Dirac 演算子 $\gamma^\mu D_\mu$ の指数と呼ばれる．アノマリーの式は指数とトポロジカルな量を結びつける式である．この種の公式は **Atiyah–Singer の指数定理**と呼ばれる．これによると $2n$ 次元におけるカイラルアノマリーは $\mathrm{tr}\ F^{2n}$ で与えられることがわかる．

カイラルアノマリーは，π^0 中間子の 2γ 崩壊の理解，宇宙のバリオン数の破れ等，素粒子物理の問題に重要な役割を果たしている．ゲージ場に結合したカイラルフェルミオンは，局所ゲージ変換に関するアノマリーをもつ．ゲージ変換のアノマリーは，一般に理論のくりこみ可能性やユニタリー性を破り，理論が統御できなくなる．整合性のある理論の場合，ゲージアノマリーや重力アノマリー

は存在しないか，あるいはそれが相殺する機構がなければならない．素粒子の標準模型においてこのアノマリー相殺は構成上，重要な役割を果たしてきた．またアノマリーのない理論を構築することは，無矛盾な5種類の超弦理論の構築において重要な指導原理であった．

3.3 アノマリー流入機構

$2n$ 次元時空におけるゲージアノマリーは，$2n+2$ 次元時空におけるカイラルアノマリーと関係があることが知られている．この関係は，Wess–Zumino 整合性条件をみたす解を降下方程式を解くのが標準的な方法である[1)]．これを物理的なセットアップで説明したのが Callan–Harvey[5)]である．4次元 $U(1)$ ゲージ場 A_μ，複素スカラー場 $\phi=\frac{1}{\sqrt{2}}(\phi_1+i\phi_2)$ と Dirac フェルミオンからなり，そのラグランジアンが

$$\mathcal{L} = -\frac{1}{4e^2}F_{\mu\nu}F^{\mu\nu}+\bar{\psi}i\gamma^\mu D_\mu\psi + (D_\mu\phi)^*(D^\mu\phi)-\bar{\psi}(\phi_1+i\gamma_5\phi_2)\psi - V(\phi)$$

である系を考える．ポテンシャル $V(\phi)$ は (2) と同じである．この理論は古典的には大域的な $U(1)$ 対称性（Peccei–Quinn 対称性）

$$\phi\to e^{i\alpha}\phi, \quad \psi\to e^{-i\alpha\frac{\gamma_5}{2}}\psi$$

の下で不変であるが，量子論ではアノマリーのため破れる．さらに $U(1)$ 対称性は自発的に破れる．Goldstone 場（アクシオンと呼ばれる）a を $\phi=\frac{v}{\sqrt{2}}e^{ia}$ で導入すると a とゲージ場の相互作用項は

$$\mathcal{L}_{\mathrm{axion}} = \frac{a}{16\pi^2}F_{\mu\nu}*F^{\mu\nu}$$

となる．アクシオン場とゲージ場の結合のため Maxwell 方程式は

$$\partial^\mu F_{\mu\nu}=j_\nu, \quad j_\nu=\frac{e^2}{16\pi^2}\partial^\mu(a*F_{\nu\mu})$$

と変更される．

スカラー場の真空は $\pi_1(S^1)=\mathbb{Z}$ で分類され，アクシオンはボーテックス解をもつ．例えば巻き付き数1の場合スカラー場は，円筒座標 (ρ,θ,z) で

$$\phi(\rho,\theta)=f(\rho)e^{i\theta}$$

の形になる．ここでボーテックスは z 方向に伸びており，$\rho\to\infty$ で $f(\rho)\to\frac{v}{\sqrt{2}}$ となる．このボーテックス上のフェルミオンの運動方程式の解は

$$\psi_- = \eta(x_0,x_3)\exp\left[-\int_0^\rho f(\sigma)d\sigma\right],$$

$$\psi_+ = -i\gamma^2\psi_-$$

となり，$\eta(x_0,x_3)$ は2次元カイラルフェルミオンとなる．

$$i\gamma^a\partial_a\eta=0, \quad \gamma_{\mathrm{int}}\eta=-\eta.$$

ただし $a=0,3$ はボーテックスに沿った方向の時空の添字，$\gamma_{\mathrm{int}}=-\gamma^0\gamma^3$ は対応するカイラル行列である．このカイラルフェルミオンはゲージ場と結合しゲージアノマリーをもつ，しかし全体で見るとその効果はアクシオンの結合を通じてボーテックスに流入するカレントと打ち消し合い，その異常性は消える．この効果をアノマリー流入機構といい，トポロジカル欠陥上の場の理論の性質を調べる上で重要な情報を与える．例えば，格子上のカイラルフェルミオンの構成や物性系への応用がある．また超弦理論を統一する11次元のM理論における M5 ブレーンは，そのラグランジアンもよくわからない非局所的な理論であるが，このアノマリー流入機構を通じて間接的に調べることができる．

4. K 理論と D ブレーン

4.1 D9–反 D9 ブレーン

超弦理論には，D ブレーンと呼ばれる10次元中の超平面で，開弦が端点を持つことができる物体がある．この物体にくっつく開弦のスペクトルを調べることにより，ブレーン上の低エネルギー有効理論は，ゲージ場とスカラー場を含むことがわかる．特に N 枚の平行 Dp ブレーンは，その世界体積が $d=p+1$ 次元であり，$U(N)$ ゲージ理論が得られる．一方で D ブレーンは超弦理論の閉弦状態に属する Ramond–Ramond（R–R）場

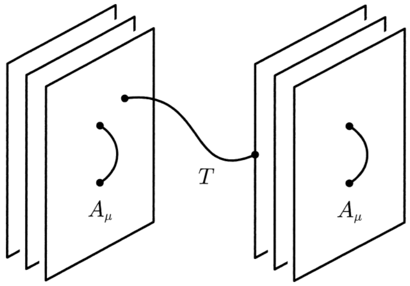


図 2　D9–反 D9 系.

に結合する．Dp ブレーンには，R–R $p+1$ 形式場が結合し，その電荷は

$$Q_p = \int_{\Sigma_{p+1}} C_{p+1} \tag{9}$$

となる．II 型超弦理論には IIA, IIB 型の 2 種類があり，超対称性により IIA では p が偶数に，IIB 型では p が奇数に対応する D ブレーンが安定に存在し得る．

IIB 型超弦理論において，n 枚の D9 ブレーンと n 枚の反 D9 ブレーンからなる系を考える (図 2)．反 D9 ブレーンは D9 ブレーンの向きを反転したもので逆符号の R–R 荷をもっている．この系の有効理論は，それぞれのブレーン同士をつなぐ弦から生じる 2 種類の $U(n)\times U(n)$ ゲージ場を含む．さらに D9 と反 D9 ブレーンをつなぐ弦から $n\times n$ 行列のスカラー場 T が生じ，それは $U(n)\times U(n)$ の双基本表現，つまり T はそれぞれの $U(n)\times U(n)$ ゲージ変換行列 U_1, U_2 に対して

$$T \to U_1 T U_2^{-1} \tag{10}$$

と変換する．$T=0$ のまわりでのポテンシャルは，弦の摂動論で求められ，負の質量 2 乗項が現れる．このため T はタキオン場と呼ばれる．ヒッグス場と同様にこの系は不安定であるため，ポテンシャルの最小値に落ち着くことになる．このポテンシャルの形を超弦の摂動論から求めることは困難であるが，それには最小値があり，その最小値では D9 と反 D9 ブレーンが対消滅すると予想されている[6)]．

ゲージ・ヒッグス模型と同様に，このスカラー場が非自明なトポロジカルな配位をもつときにどのような物体が現れるであろうか．いま考えている系ではブレーン自体が対消滅，対生成するため一つの固定した階数のゲージ群を考えるのは適当でない．

4.2 K 理論

N 枚の Dp ブレーンが重なった系とそれと平行に M 枚の反 Dp ブレーンが重なった系を考える．それぞれ $U(N)$ バンドル E, $U(M)$ バンドル F の構造をもつとする．この系を対

$$(E,F)$$

で表す．もし N 枚の Dp ブレーンと N 枚の反 Dp ブレーンの構造が全く同じ（同形）である場合は，このブレーンは対消滅して，真空になってしまう．従って

$$(H,H)$$

のように表される対は真空と同一視される．またブレーン–反ブレーンの系 (E,F), (E',F') はそれぞれ適切な対生成を行い，$(E\oplus H, F\oplus H)$, $(E'\oplus H', F'\oplus H')$（$E\oplus H$ はファイバーの直和をとって得られるバンドルである）とした後同形となれば，これらを同一視することができる．この関係を

$$(E,F)\sim(E',F')$$

と表す．ある底空間 X 上のバンドルの対をこの同値関係で同一視した同値類を考えると，この同値類全体は（バンドルのファイバーの直和に関して）アーベル群をなす．これを X の **K 群**と呼び，$K(X)$ と書く．特に階数が等しい（$N=M$）対 (E,F) に制限した群は $\tilde{K}(X)$ と書かれる．k 次元球面 $X=S^k$ に対して，$\tilde{K}(S^k)\simeq\mathbb{Z}$ (k: 偶数), $\tilde{K}(S^k)\simeq 0$ (k: 奇数) であることが知られている．また曲率 F の Chern 指標

$$ch(E) = \mathrm{tr}\ e^{-\frac{F}{2\pi i}}$$

は $ch(E\oplus F) = ch(E)\oplus ch(F)$ をみたし，バンドルから底空間 X の偶数コホモロジー $H^{\mathrm{even}}(X,\mathbb{Q})$

$= \bigoplus_{j\geq 0} H^{2j}(X,\mathbb{Q})$ への写像である．写像

$$ch : (E,F) \mapsto ch(E) - ch(F)$$

は $K(X)\otimes\mathbb{Q}$ から $H^{\mathrm{even}}(X,\mathbb{Q})$ への同形写像を与えることが知られている．

4.3 タキオン場と D ブレーン

D9–反 D9 ブレーンが N 枚ずつある不安定系において，タキオン場 T がトポロジカルに非自明な配位をとりつつ対消滅した場合，最終状態にはより低い次元の安定 Dp ブレーンが現れ，そのトポロジーは K 群 $\tilde{K}(S^{9-p})$ で分類される[7)]．また生じる Dp ブレーンの R–R 荷は D9–反 D9 系の世界体積上の Chern–Simons 項

$$\int_{\mathbb{R}^{10}} ch(E,F)(C_{10} + C_8 + \cdots)$$

の C_{p+1} 項を評価することによりわかる．例えば R–R 場 C_{10} に比例する項は $n - n = 0$ で消え，その場との結合はゼロである．

安定な D ブレーンのためには，p は奇数の場合が許される．その余次元を $2k$ とおくと，Dp ブレーンを囲む無限遠の球面は S^{2k-1} となる．余次元空間の座標を $x^1, \cdots, x^{2k}$ とし，その空間回転群 $SO(2k)$ を考える．D9 ブレーン側のタキオン場の表現を $SO(2k)$ のスピン表現 S^+（正のカイラリティ），反 D9 ブレーン側の表現を S^-（負のカイラリティ）に属するようにとる．このためにはブレーンの枚数を $N = 2^{k-1}$ ととればよい．このとき，タキオン場は，$2k$ 次元ガンマ行列 $\Gamma_1, \cdots, \Gamma_{2k}$ を用いて

$$T(x) = f(r)\Gamma_i x^i, \quad r = |x|$$

と表される．ここで $f(r)$ は $r \to \infty$ で真空に値をとる．この解は S^{2k-1} 上で巻き付き数が 1 であるような解であり，$p+1$ 次元世界体積上に局在する $Q_p = 1$ の Dp ブレーンが生じる．この D ブレーンの構成法は，他のタイプの超弦理論に適用され，安定な D ブレーンの分類に有効である．

5. おわりに

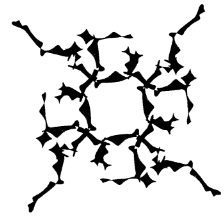
ゲージ理論におけるトポロジーの役割を，真空を特徴付けるスカラー場（ヒッグス場）の配位空間のトポロジーを例にとって説明してみた．トポロジーは，物事を分類し整理することだけではなく，実際的にも有用な概念である．興味深いのは，様々なトポロジー的概念が，場の理論や弦理論に実にうまく埋め込められているように見えることである．この状況に超対称性という性質を加味すると，トポロジーは場の理論とより密接に関係したものになる．超対称性をツイストして構成された位相的場の理論，位相的弦理論において，相関関数や分配関数といった物理量はトポロジカル不変量である[8)]．今後も場の理論とトポロジーは互いに新しい概念を取り入れつつ，両者が発展していくことが期待される．

参考文献

1) 全般的なレビューとして T. Eguchi, P.B. Gilkey and A.J. Hanson, *Phys. Rept.* **66** (1980), 213. また日本語の教科書として中原幹夫著，佐久間一浩訳，『理論物理学のために幾何学とトポロジー I, II』，ピアソンエデュケーション，2000 年．V.P. ナイア著，阿部泰裕，磯暁訳，『現代的な視点からの場の量子論　発展編』，丸善出版，2012 年をあげておく．
2) 数理科学 2014 年 7 月号特集「モノポールの謎」収録の記事参照．
3) J.A. Harvey, "TASI 2003 lectures on anomalies", hep-th/0509097.
4) K. Fujikawa, *Phys. Rev.* **D29** (1984), 285.
5) C.G. Callan and J.A. Harvey, *Nucl. Phys.* **B250** (1985), 427.
6) A. Sen, "Non-BPS states and Branes in string theory", hep-th/9904207.
7) E. Witten, *JHEP* **9812** (1998), 019 [hep-th/9810188].
8) 本特集号における藤博之氏の記事参照．

（いとう・かつし，東京工業大学大学院理工学研究科）

高分子とトポロジー



手塚 育志

1. はじめに

プラスチック，フィルム，合成繊維などの素材となる合成高分子，タンパク質，核酸（DNA），天然繊維などを構成する生体高分子は，いずれも基礎単位となる化学構造（モノマー単位）が数百から数万個連結された一次構造を持つことが知られている[1]．これら高分子物質は，メタンやベンゼンなどの低分子物質と「分子」として共通の化学・物理的性質をもつが，その「かたち」に着目すると，幾何学的またはトポロジー的な違いが認められる．一般に，低分子化合物の「かたち」は，分子を構成する原子間の結合角（例えば炭素のまわりの結合角）および原子間の結合距離を不変量として，いわばユークリッド（かたい幾何学）的構造体として表現される．一方，高分子化合物は，モノマー単位の化学構造，およびその連結様式によって，剛直（かたい棒状）なものから柔軟（やわらかいひも状・屈曲性）なものまで，様々な特性を示す．さらに，ポリエチレンのような屈曲性高分子では，炭素原子間結合の回転自由度のために，セグメントの全長は一定・不変のままで，高分子の長さスケールでは，1次元的な「かたち」を変形することができる．また，末端をもつ屈曲性高分子によって作られる直鎖線または曲線状の「かたち」と，相互に変換できる末端のない単環（ring），三角形，四角形の「かたち」は区別される．このように，やわらかくて長い「ひも」としてイメージされるナノスケールの分子としての高分子物質の「かたち」の特性は，トポロジー（やわらかい幾何学）的アプローチによって考察できる[2]．

また，結び目（knot）と単環のひもは，直感的には「区別される」かたちだが，トポロジーでは，結び目と単環は「4次元空間」では相互変換できるとされる．さらに，単環状と結び目状のDNAは，トポイソメラーゼ（酵素）によって相互変換することが知られているが，DNA鎖の化学的な「切断–再結合」もストロボ的にはトポロジー的な「線分のすりぬけ」と同じに見える[3]．

このように，高分子の「かたち」の特性を理解し・予測するための数学・幾何学的アプローチは，抽象化によって事象の本質を顕在化させることで，現実の空間で目に見える（ように直感される）マテリアルを取り扱う材料科学に，先入観のない新たな視点を提供する[4]．実際，「かたち」をイメージすることは，その本質を理解することと密接に結びつき，また，様々な「かたち」と「はたらき」との思いがけない関係は，自然現象や人工物の様々なレベルで体験できる．私たちの直観は，しばしば固定観念として常識化されるが，数学・幾何学からの挑発は，これを打ち破る契機となるかもしれない[5]．

特に最近，高分子の構造設計の自由度が，連鎖的な1次元的成長（低分子モノマーの重合）で得られる直鎖状だけでなく，多様な非直鎖（分岐・環）状へと拡大し「かたち」から始める高分子のマテリアルデザインが急速に進展している．した

がって，高分子の「かたち」の基本特性を理解することは，高分子材料設計の基礎としても不可欠になっている[2]．

結び目の幾何学的研究は，原子の内部構造を理解する数学的モデルとして提案されたことによって20世紀初頭に大きく進展したと伝えられる．残念なことに，この「魅力的な」仮説は「原子核–電子」モデルによって否定されたが，数学・幾何学が喚起する想像力を示している．やがて結び目は，生物の基本構成分子であるナノスケールのDNAで発見され，その生化学的な役割についての理解も進んでいる．さらに最近，人工的な結び目分子を作成することも可能になり，例えば三つ葉結び目にも右巻きと左巻きがあることがナノスケールでも実証されている[3]．

本稿では，やわらかいひも状の高分子を組み合わせて構築される多様な多環状高分子の「かたち」の分類および相互変換について，**高分子トポロジー化学**の視点から解説し，さらに高分子の「かたち」の特性を踏まえた複雑な構造の高分子設計・合成技術・「匠の技」の最近の成果についても紹介する[2]．

2. 高分子の「かたち」とグラフ表示

高分子の基本的特徴はやわらかく細い「ひも」としての挙動であり，直鎖状高分子は，しばしばランダムコイル（糸まり）の曲線として表示される．非直鎖状（分枝・含環）高分子についても，やわらかいセグメント（線分・辺）の組合せによって一次構造が形成されるが，直鎖状および環状高分子がランダムに折りたたまれた「糸まり」では，セグメントの全長が同一でも平均サイズ（慣性半径）が異なり，また高分子集合体中での一本の高分子鎖のダイナミクスの違いも示されている．このように，高分子の「かたち」の違いはその基本分子特性に反映し，さらに高分子材料設計にも大きな役割を果たすことになる[2]．

高分子鎖の「かたち」を示す幾何学図形は，頂点（node）と辺（edge）で構成される．この抽象化された概念である「頂点の集合とそれらの結び方（辺の集合）」が「グラフ」である．グラフ図形を取り扱うのが**グラフ理論**（graph theory）で，広い応用領域がある[6]．例えば，鉄道や路線バスの路線図では，線路・経路の実際の形状よりも，駅（頂点）がどのように路線（辺）でつながっているかが重要となる．つまり路線図では，駅と駅の「つながり方」が明確になるように，駅間の距離や配置，路線の形状などが抽象化・デフォルメされ表示される．また同様に，電気配線の回路図や電力線のネットワーク図も，現実の配線の状況ではなく，「接点のつながり方」を明確に表示するグラフ図形となる．さらに，WWWにおけるウェブページのリンク関係を示す構造もグラフ図形で表示される．



図1　$K_{3,3}$ グラフおよび同形グラフ．

高分子の「かたち」も，末端または分岐点（頂点）の「つながり方」に着目したグラフ図形（高分子グラフ）によって，頂点間の距離に依存しない幾何学的性質を表示することができる（グラフの同形性）．すなわち，単環，三角形，四角形はいずれも同形となり，グラフ理論で良く知られる3重縮合四環構造の $\boldsymbol{K_{3,3}}$ **グラフ**は，図1に示すように同形にもかかわらず一見異なるグラフ表示ができる．

単環および多環高分子のグラフ図形を系統的に分類すると「**Ring Family Tree**」（図2）となる[5]．単環から出発して3種の双環構造，すなわち縮合型（θ 形），スピロ型（8の字形）および連結型（手錠形）が生じ，さらに15種の三環構造へと発展していく．このうち，4種の縮合型構造は，それぞれ α，β，γ，および δ グラフと呼ばれる．さらに，四環構造には，トポロジー幾何学（グラフ理論）で非平面グラフとして知られる $K_{3,3}$ 構造が含まれる．これらユニークな幾何学構造を高分子で組み立て（ナノテクノロジー），その分子特性と幾何学的性質との関係を解明し，高分子材料

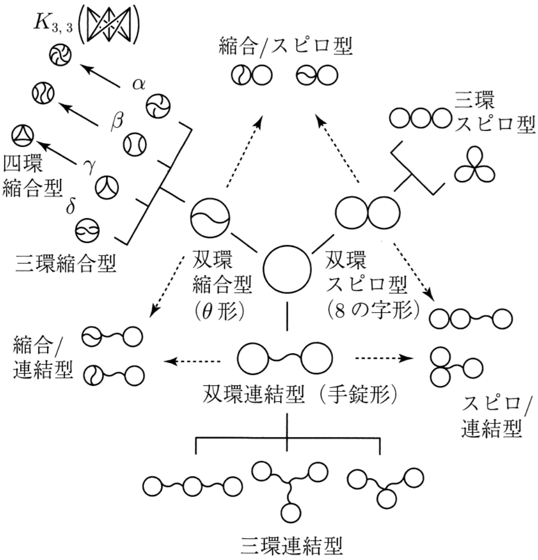


図2　単環および多環構造の系統図（Ring Family Tree）.

の機能設計につなげる研究が進展している[2].

3. 高分子トポロジーの体系的分類

有機化学では，化合物の構造（特に炭素骨格構造）を折れ線に簡略化し，分子グラフとして表示する．一般的に用いられるこのモデル化法は，簡潔に分子構造を表現し，特にアルカン類の骨格構造とその異性（構造異性）を考察するために役立つ．もちろんアルカン類では，先に述べたユークリッド幾何学的な制約条件を考慮することになり，折れ線の一つの辺が炭素間結合に対応し，また炭素の最大価数4に対応して分岐点での枝数も4を超えることはない．

一方，屈曲性高分子の分枝・環状構造を含む1次元的な「かたち（トポロジー）」は，やわらかく細い「ひも」としての特性と，末端または分岐点（頂点）の「つながり方」を考慮した「高分子グラフ」で表示される[7]．ここでは，ひもの全長（重合度または分子量に対応）は不変量となる一方，末端間，末端–分岐点間，分岐点間の距離は可変量とされる．また，分岐点での枝数が4を越えるグラフも可能となる．有機化学で用いられる直鎖・分枝飽和アルカンおよび環状構造を含む飽和アルカンの構造異性体を示す分子グラフを基礎に，これらの拘束条件を取り込んだ高分子グラフを作成すると，分枝・環状構造高分子の「かたち」の系統的な分類ができる（図3）．

まず，直鎖・分枝高分子（Alkane からA群とした）の高分子グラフは，直鎖・分枝飽和アルカン（C_nH_{2n+2}）の分子骨格を折れ線で表した「分子グラフ」と対応させて作成できる（図3–A）．ここでAの添字として，対応するグラフが発現するC_nH_{2n+2}の最小のn値を表示し，カッコ内に末端および分岐点の総数を示すと，例えばn本鎖スターポリマーは，$A_{n+1}(n,1)$と表示される．またこの分類法で，高分子グラフはnに対して系統的・階層的に序列化できることは注目される．したがって，あるnで現れる「かたち」は，$n < n'$のn'でも常にみられる．

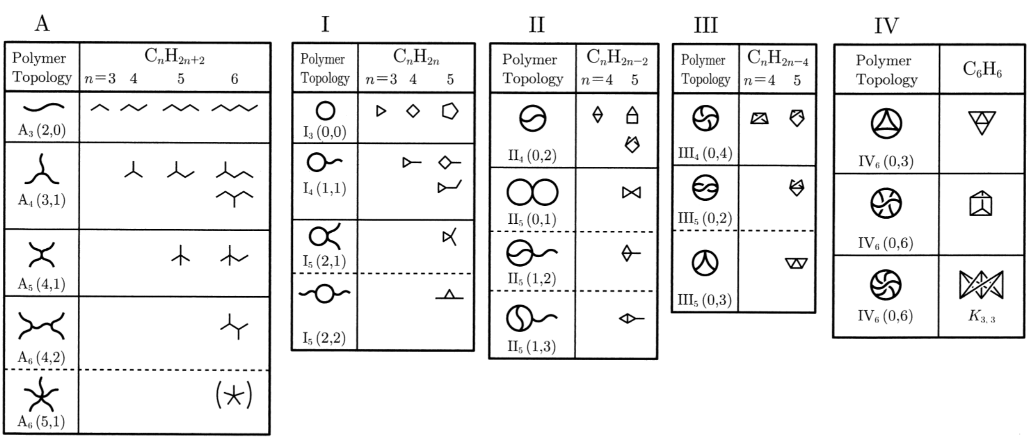


図3　高分子グラフの系統的分類.

さらに，単環状構造を含む高分子（単環からI群とした）の高分子グラフについても，先のA群グラフ図形と同様，飽和環状アルカン（C_nH_{2n}）の分子グラフと対応させ，系統的・階層的に分類することができる（図3–I）．ここで，最も単純な，末端数および分岐点数が最小となるグラフ図形が，高分子化学で基本とされる直鎖（末端数＝2，分岐数＝0）ではなく，環（末端数＝0，分岐数＝0）となることは興味深い．また，多環状および複環状構造を含む高分子（双環はII群，三環はIII群，四環はIV群とした）の高分子グラフもA群，I群と同様に，多環飽和アルカン（C_nH_{2n-2} 等）の分子グラフと対応させ，系統的・階層的に序列化することができる（図3–II～IV）．特にIV群には，プリズマンや $K_{3,3}$ 構造に対応するユニークなトポロジーが含まれることに注目したい．

ここで示した高分子の「かたち」の帰納的分類法は，有機化学の基礎であるアルカンの構造異性体の分子グラフ表示に対応していることからなじみ易く，直感的に高分子の「かたち」の体系を理解できる有用なものと考えられる．一方この分類法は経験的なものであり，この分類法の背景となるトポロジー法則が明らかになれば，A群およびI～IV群のトポロジー的な相互関係の理解がさらに進むと期待される．

4. 高分子のトポロジー「異性」

化学の基本コンセプトの一つに，「異性（isomerism，ギリシャ語の isos (equal) と meros (part) からの造語）」がある．分子を構成する原子の組成が同一（従って分子量も同一）にもかかわらず性質の異なる一対の化合物が異性体（isomer）となる．異性体の性質の違いは種々の静的・動的「構造（かたち）」を反映し，多くの異性様式がある．有機化合物の異性体には，化合物を構成する原子または原子団の結合様式（connectivity）の異なる構造異性体（constitutional isomer）と，結合様式は同じで結合角，結合回転などのユークリッド幾何学的構造パラメータの異なる立体異性体（stereoisomer）がある．さらに，この2種の異性体には，「分子グラフ」を用いる異性体間の相互変換（異性化）の表現にも明確な違いがある．すなわち，構造異性体では，結合様式の違いから分子グラフの少なくとも適当な2カ所の切断と組み替えによる再結合が必要となり，立体異性体では，分子グラフを切断することなく，結合角，結合回転に対応する分子グラフのユークリッド幾何学的パラメータを可変（トポロジー化）とすることで相互変換される[2]．

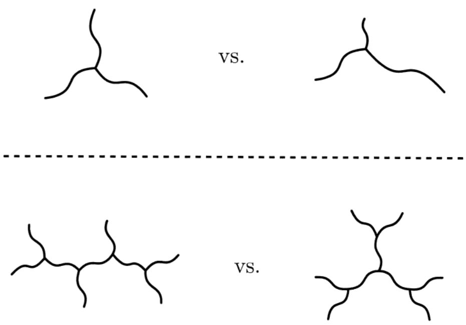


図4 同形（上）と同形でない（下）高分子トポロジー異性体．

屈曲性高分子の異性では，ユークリッド幾何学的な低分子有機化合物にはないユニークな現象が認められる．例えば，3本鎖の星形高分子には，3本の枝成分の長さの合計は一致しても，それぞれの枝成分の鎖長が異なる異性体がある（図4上）が，この構造異性体は同形の高分子グラフになる（topologically equivalent）．一方，くし形と樹枝形の高分子異性体（図4下）では，高分子グラフは同形にならない（topologically distinctive）．そこで，高分子異性体グラフの幾何学的特性を比較すれば，実験およびシミュレーション研究と合わせて，高分子トポロジーの基本特性に及ぼす効果が明確に示されると期待される．

さらに，単環，結び目および絡み目高分子（catenane）や，3種の双環状高分子（θ 形高分子，手錠形高分子，および手錠形の環成分が絡み目となったプレツェル形高分子）（図5）でも，同様の**高分子トポロジー異性**が認められる．すなわち，θ 形高分子と手錠形高分子（または θ 形高分子とプレツェル形高分子）は，「単環」と「絡み目」の関係

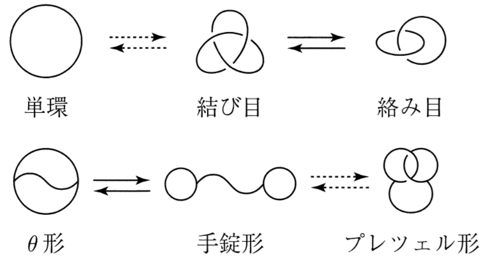


図5 単環および双環による高分子トポロジー異性.

に対応する「トポロジー的に非等価な構造異性体」となり，一方，手錠形高分子とプレツェル形高分子は，興味深いことに「単環」と「結び目」の関係に対応する「トポロジー的に非等価な立体異性体」と分類される．ここで，「単環」と「結び目」および手錠形高分子とプレツェル形高分子は，相互変換に分子グラフの適当な1カ所の切断と組み替えによる再結合が必要となることから，通常の「立体異性体」とは区別される「トポロジー異性体」となる．

この「トポロジー異性体」は，これまで「立体異性体」の一つ（topological stereoisomer）に分類されてきた．これは，「単環」と「絡み目」が3次元空間では連続的な変形では相互変換できないものの，先に述べたように4次元以上のトポロジー空間では相互変換可能な等価な「かたち」（closed loop）となることに対応している．さらにトポロジーでは，手錠形グラフとプレツェル形グラフの相互変換が「プレツェル変換」として知られ，ここでは分岐点間距離または分岐点の総数が可変量となる．この変換操作は，現実の高分子の異性化反応と直接的には対応しないが，高分子の「かたち」の幾何学的な関係を示すものとして興味深い．

直鎖状高分子の「折りたたみ」に基づく様々な「かたち」の生成は，DNAやたんぱく質の高次構造形成など生化学的に重要なプロセスだが，高分子のトポロジー異性の視点からも注目される．例えば，直鎖状高分子の末端と内部に4カ所の結合点を導入して折りたたむと，1回折りたたみでは，先の分類のI群に相当する単環および環鎖複合（おたまじゃくし）型の高分子異性体が生成し，さらに2回折りたたみでは，先の分類のII群のうち最も基本となる3種の双環トポロジー，すなわち縮合型（θ形），スピロ型（8の字形）および連結型（手錠形）のすべてに相当する高分子異性体が生成する（図6）．タンパク質・ポリペプチドでは，直鎖状セグメントの特定位置に配置されたにシステイン残基の橋かけ結合による折りたたみが生じるが，この巧妙な「折りたたみ」プログラムを駆動するタンパク質ジスルフィド異性化酵素（protein disulfide isomerase; PDI）系の動作メカニズムも明らかになってきた．今後，合成高分子の自在な「折りたたみ」を実現する有機化学プロセスが開発され，高分子材料設計の新機軸となることが期待される．

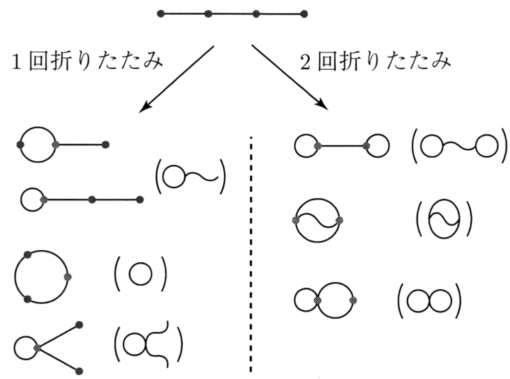


図6 高分子の折りたたみによるトポロジー異性体の生成.

5. 高分子トポロジー化学の新展開

高分子合成化学のめざましい進歩に伴い，多様な非直鎖状，特に分枝状高分子の合成が可能になってきた[8]．ところが対照的に，最近まで単環・多環トポロジー高分子の効率的合成は高分子合成化学の困難な挑戦課題となっていた．一方，単環状，多環状高分子は，末端が存在しないという特異な「かたち」に基づく新奇物性が予測され，高分子材料設計の新しい可能性としての期待も高まっている[2]．

筆者らは，近年の有機合成化学の成果である「自己組織化・超分子形成」コンセプトに着目し，単環・多環高分子の効率的合成システムの開発を進めてきた[9]．具体的には，疎水性高分子の末端に導入したイオン性官能基（イオン対）による静電

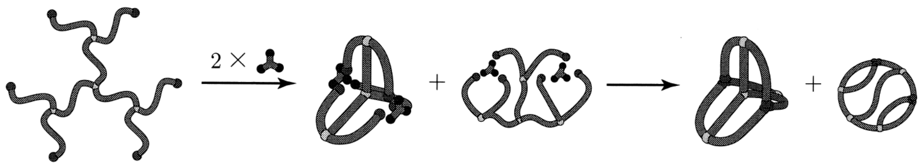


図 7　ESA-CF 法による $K_{3,3}$ グラフ高分子とトポロジー異性体の合成.

相互作用を自己組織化の駆動力として「仮止め」された超分子構造を形成し，さらにこれを共有結合・固定化する（electrostatic self-assembly and covalent fixation：**ESA-CF 法**）もので，直鎖・分枝状高分子末端に導入した適当な歪みをもつ環状アンモニウムカチオンと求核反応性をもつカルボン酸アニオンとのイオン対に基づく静電相互作用と，その加熱による開環共有結合化反応との組合せとなる．これまでに，単環をはじめ，3 種の双環（8 の字形，θ 形，および手錠形），三環（三つ葉形）などの様々な多環構造（図 2 参照），さらに環–鎖セグメントを組み合わせた，おたまじゃくし構造（tadpole 形，および twin-tail tadpole 形）も構築された[2]．

また，両末端反応性（2 官能性）直鎖高分子と 3 官能性アニオン，または 3 本鎖星形（3 官能性）高分子と 2 官能性アニオンとの組合せから，θ 形および手錠形高分子の異性体混合物が合成された（図 5 参照）．さらに得られた異性体は，逆相クロマトグラフィーによって分離され，異性体生成比に基づく間接的方法に加え，異性体の平均的糸まりサイズの比較や異性体それぞれのかたちの化学的変換によって同定された．

そして最近，高度に制御された 3 重縮合四環構造で，高分子合成化学の技術進歩・「匠の技」を競う標的化合物となっていた，$K_{3,3}$ グラフ高分子の合成が ESA-CF 法によって達成された（図 7）[10]．この $K_{3,3}$ グラフ構造（図 1 参照）は，同形トポロジー構造の環状オリゴペプチド（cyclotide）がユニークな生理活性を示すことが示され，バイオ分野でも注目されている．したがって，ナノスケール $K_{3,3}$ グラフの構築は，高分子合成化学から生化学・トポロジー幾何学まで広くインパクトを与えるものと期待される．

この ESA-CF 法を他の選択的・高効率な化学反応プロセスと組み合わせ，さらに多様な多環高分子の合成が進められている[2]．そして直鎖状・分枝状高分子，および ESA-CF 法で合成できる環状・多環状高分子に，適切に選択した反応性基を導入して効率的縮合反応（クリップ反応）に用い，単環および双環状高分子，さらに 2 重縮合三環高分子（図 2 に示すとおり 4 種類存在する）の一つである，8 の字を折りたたんだ δ–グラフ高分子が合成された．また，「かたち」の対称性から，ESA-CF 法での一段階合成が難しいスピロ型および連結型（手錠・パドル形）多環高分子（図 2 参照）も，直鎖状・分枝状高分子，および ESA-CF 法で合成できる環状・多環状高分子に，それぞれ相補的な反応性基を導入して高効率結合反応（クリック反応）すると合成できる．さらに，2 重縮合三環構造の γ–グラフ高分子（図 2 参照）の合成も，ESA-CF 法およびクリック反応とクリップ反応を組み合わせた高分子の「折りたたみ」により達成された．

6. おわりに

本稿で紹介した「高分子トポロジー化学」は，現代数学・幾何学に接点を持つ材料科学の基礎研究として，今後幅広い方面での学際的研究の契機となることが期待される（本年度から，科学研究費・特設分野研究（連携探索型数理科学）による共同研究（研究代表者：下川航也，結び目やグラフのトポロジーを応用した新高分子理論に基づく特性・機能創出；課題番号 26310206）が開始された）．とりわけ高分子材料科学・工学へのインパクトとして，高分子の「かたち」ライブラリーの構築によって高分子材料設計の基礎となる種々の分析・計測・シミュレーションに不可欠な「標準試

料」の提供が実現する．これにより，直鎖・分枝状高分子とは基本的に異なる環状および複環状構造を含む「かたち」からはじめる高分子設計の自由度を大きく拡大できよう．

さらに，高分子のフレキシブル骨格を剛直化することによって多環状高分子ナノオブジェクトが構築できる．これは，ボトムアッププロセスとトップダウンプロセスとを統合した次世代ナノシステムの技術基盤となると期待される．

しかしまた同時に，以下のトポロジー幾何学のパイオニアの言葉こそ，これからも数学や他の分野の基礎研究の駆動力として若いみなさんの心に響き続けることを願って已まない．

「科学者は実益あるがゆえに自然を研究するのではない．自然に愉悦を感ずればこそこれを研究し，また自然が美しければこそこれに愉悦を感ずるのである．自然が美しくなかったならば，自然は労して知るだけの価値がないであろう．また，人生も生きるだけの甲斐もないであろう．」（アンリ・ポアンカレ，『科学と方法』岩波文庫）

参考文献

1) 井上祥平,『はじめての高分子化学』, 化学同人 (2006).
2) Y. Tezuka, Ed., *Topological Polymer Chemistry: Progress of cyclic polymers in syntheses, properties and functions*, World Scientific, Singapore (2013).
3) E. Flapan, *When Topology Meets Chemistry: A Topological Look at Molecular Chirality*, Cambridge University Press, Cambridge, UK (2000).
4) 手塚育志他，『トポロジーデザイニング—新しい幾何学からはじめる物質・材料設計』，NTS (2009).
5) 手塚育志，表面科学 Vol.**34**, No.1; 特集「現代幾何学と物質科学との新融合領域」, pp.27–32 (2013).
6) 落合豊行，『グラフ理論入門』，日本評論社 (2004).
7) Y. Tezuka, H. Oike, *J. Am. Chem. Soc.*, **123**, 11570 (2001).
8) N. Hadjichristidis, A. Hirao, Y. Tezuka, F. Du Prez, Eds., *Complex Macromolecular Architectures, synthesis, characterization and self-assembly*, Wiley, Singapore, p.3 (2011).
9) H. Oike, H. Imaizumi, T. Mouri, Y. Yoshioka, A. Uchibori, Y. Tezuka, *J. Am. Chem. Soc.*, **122**, 9592 (2000).
10) T. Suzuki, T. Yamamoto, Y. Tezuka, *J. Am. Chem. Soc.*, **136**, 10148 (2014).

（てづか・やすゆき，東京工業大学大学院理工学研究科）

Wittenとトポロジカル場の理論の登場

理論物理学から生み出される新たな数学

藤　博之



理論物理学の研究は時折，思いもかけない形で新たな数学を生み出し，そこから発展した数学が再び物理学に革新をもたらすことがある．本稿では，こうしたフィードバックの最も大きな成功例の一つとして知られる，トポロジカル場の理論の誕生の歴史を，当時のめざましい進展とともに紹介する．

1. トポロジカルな経路積分

1988年，その後の数理物理学の新たな方向を与える論文がE. Wittenによって発表された[1]．きっかけとなったのは，超対称性を持ったある量子力学の模型であった[2]．この模型は，WittenがMorse理論を理解するために生み出した，いわば「おもちゃ」のような模型である．しかしながら，そこには理論物理学を通じて幾何のトポロジカルな性質を理解するための本質が詰まっており，トポロジカル場の理論を生み出すきっかけとなった．

物理学から幾何の大域的本質を引き出す鍵は，ずばり「経路積分」にある．一般に経路積分は，無限次元でしかもしばしば発散を伴う積分であり，そこに生じる発散は「正則化」と呼ばれる物理的手法によって手で押さえつけながらいったんその値を評価し，その後「繰り込み」という操作を経てようやくその結果を理解できる．ところが，ひとたび理論に「トポロジカル」という制約が課されると，とたんにこの気難しい積分は局所化のメカニズムによって，有限次元のおとなしく素直な積分に変貌し，幾何のトポロジカルな側面を浮き彫りにすることができる．このWittenの量子力学模型では，トポロジカルという制約を超対称性に「ツイスト」と呼ばれる操作を施すことで見事に実現し，Morse理論の物理学的意味づけを与えたのである．

こうしたWittenのアイデアは，M. Atiyahが抱いていたトポロジカル場の理論のアイデアを生み出す上での，大きなきっかけを与えた[3]．当時，4次元多様体の可微分構造の違いを検出するDonaldson不変量が提唱され，微分位相幾何学の研究に大きな進展がもたらされようとしていた．AtiyahはA. Floerによって提唱されたFloerホモロジーのアイデアに基づいて，4次元多様体のDonaldson不変量が記述できることに着目し，その背景に何らかの量子場の理論があるのではないかと推測した．ここに上述のWittenのアイデアが登場し，このパズルをひも解くための最後のピースが揃うこととなる．

2. トポロジカル場の理論の登場

Atiyahのアイデアに対し，今度はWittenが答える番となる．「Floer理論やDonaldson不変量の背景にあるトポロジカルな場の理論は何か？」という問いに対し，Wittenは明快に「$\mathcal{N}=2$超対称性を持った4次元のゲージ理論にツイストを施して得られる場の理論」であると答えた[1]．実際，このツイストされたゲージ理論を用いると，Donaldson不変量の積分表示が，このトポロジカル場の理論の演算子の相関関数に対する経路積分として見事に実現され，確かにこのアイデアが正しいことが確かめられる．こうして提唱されたトポロジカル場の理論のアイデアによって，物理学者にも数学者にも納得できる形で4次元多様体の位相不変量に対する新たな解釈を与えることに成功した．

それ以降，トポロジカル場の理論はめざましい進展を遂げる．WittenはAtiyahのアイデアに基づいて，今度は超対称シグマ模型と呼ばれる2次元場の理論にツイスト操作を施して，トポロジカルシグマ模型を提唱した．この場の理論を用いると，2次元シンプレクティック多様体の微分同相の構造について1+1次元版のFloer理論を用いて論じたGromovの理論を説明することが可能となり，トポロジカル場の理論の高い汎用性を明確にした．

Wittenによる快進撃は続き，さらにこのシグマ模型に2次元の重力理論を結合させて，トポロジカル弦理

論を提唱するに至った．トポロジカル弦理論には，標的空間である6次元多様体のシンプレクティック構造を検知するA-模型と複素構造を検知するB-模型があり，両者の間にはミラー対称性と呼ばれる双対性が存在することが明らかとなった．P. Candelas と X. de la Ossa による研究では，このミラー対称性を用いて6次元 Calabi–Yau 多様体へ曲面を正則に埋め込むための安定写像を数え上げる Gromov–Witten 不変量の生成母関数を決定することに成功し，代数幾何学の研究に大きな衝撃をもたらしたのである．

3. Atiyah の公理

4次元と2次元の中間に当たる3次元にも，美しい位相不変量が存在する．3次元多様体内に配置された結び目や絡み目に対し，Temperley–Leib 代数に対する作用素環論と組み紐群の表現の研究を組み合わせて，V. Jones は1984年に Jones 多項式を提唱し，それ以降，結び目理論と量子群の表現論との間で盛んに研究がなされていた．

Witten はこの Jones 多項式を場の理論として理解することを目標として，3次元のトポロジカル場の理論を今度は Chern–Simons ゲージ理論に選び，そこから3次元多様体とその結び目や絡み目に対する量子不変量を与える，Jones–Witten 理論を提唱した[4]．Jones–Witten 理論では，3次元多様体を切り貼りするサージェリーの手続きを，場の理論の経路積分として見事に実行し，結び目や絡み目のみならず3次元多様体そのものに対する位相不変量（Witten–Reshetikhin–Turaev 不変量）を物理的に経路積分を通じて具体的に計算してみせたのである．

これら一連の Witten 理論の論文の発表に呼応して，Atiyah はトポロジカル場の理論の本質を5つの公理系として明確に提唱した[5]．この公理の登場によってようやく，数学者にもトポロジカル場の理論の意味が理解できる形となり，一連の研究が数学的にも物理学的にも確立したのである．

4. トポロジカル場の理論がもたらしたもの

発見から25年を経た現在もなお，トポロジカル場の理論を通じた数学と物理学の間の研究のキャッチボールは続いており，未だに枯渇することなく新たな発見が得られている．こうしたキャッチボールの一つとして，「体積予想」にまつわるエピソードを紹介したい．

体積予想とは，結び目の色付き Jones 多項式のある漸近極限値と結び目補空間の双曲体積とが一致するという予想であるが，興味深い事にこの予想は Witten による3次元のトポロジカル重力理論を論じた論文[6]の最後に書かれたある一文がきっかけで生み出された．少し解釈を加えてその一文を記すと「量子重力理論の量子効果をゼロにする極限（半古典極限）を取れば，3次元時空多様体の計量は Einstein 方程式を満たす．そこで負の宇宙定数を持ったトポロジカル重力理論を考えれば，その自由エネルギーの半古典極限は3次元時空多様体の双曲体積となる」とまとめられる．この一文を読んだ R. Kashaev は，量子ダイログ関数を用いてその漸近極限値が補空間の双曲体積となるような結び目不変量を提唱した．その後，村上順–村上斉両氏の共同研究によって，この Kashaev 不変量と色つき Jones 多項式との関係が明らかになり，「体積予想」として提唱されたのである．

つまり，この Witten による（物理学者にとっては）何気ない一言が，トポロジーの研究に興味深い進展をもたらしたと言える．体積予想は物理学者にとっても魅力的であり，この予想を基にして結び目不変量と行列模型のトポロジカル再帰関係式との関係の研究[7]が進められ，その中から「D-ミラー対称性」と呼ばれる新たなトポロジカル弦理論の予想も提唱されている[8]．

最後にまとめると，トポロジカル場の理論の魅力は，量子物理学の言葉を用いて幾何の大域的性質を発見し，経路積分を通じて具体的に取り扱える点にある．今後，新たな物理学と数学の出会いがどういった形で再び我々を驚かさせてくれるのか楽しみである．

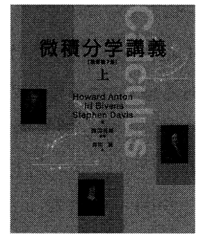
参考文献

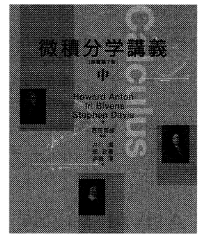
1) E. Witten, *Comm. Math. Phys.* **117** (1988), 353.
2) E. Witten, *J. Diff. Geom.* **17** (1982), 661.
3) M. Atiyah, *Proc. Symp. Pure Math.* **48** (1988), 285.
4) E. Witten, *Comm. Math. Phys.* **121** (1989), 351.
5) M. Atiyah, *Publ. Math. IHES* **68** (1989), 175.
6) E. Witten, *Nucl. Phys.* **B311** (1988), 46.
7) R. Dijkgraaf, H. Fuji, and M. Manabe, *Nucl. Phys.* **B849** (2011), 166.
8) M. Aganagic, T. Ekholm, L. Ng, and C. Vafa, arXiv:1304.5778 [hep-th].

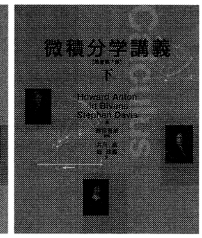
（ふじ・ひろゆき，清華大学）

微積分学講義　上, 中, 下

H. Anton, I. Bivens, S. Davis 共著, 西田吾郎監修, 上：井川満訳, 中：井川満・畑政義・森脇淳共訳, 下：井川満・畑政義共訳, AB 判, 上：408 頁, 中：424 頁, 下：476 頁, 本体；上, 中：3800 円, 下：4500 円, 京都大学学術出版会







微積分学の教科書は汗牛充棟だが，今回米国の大部の著書が新たに訳出された理由は監修者序に詳しい．評者の旧著もそうだが，日本での従来の教科書の多くが本格的な理論指向で，例や演習問題（応用諸分野にわたる）に乏しく，現在の学生が自発的に学び実力を養うのに不十分なものが大半であったのは事実である．

微積分学の教科書は時代とともに厚くなるという統計的なデータもある．まず念のために本書の目次（付録は略）を記す（かっこ内は評者の注）．

付録は主に演習問題解答だが，上巻末には 7 項目にわたって予備知識や定理の詳しい証明がある．

これでも見て取れるが，過半（上巻の全部，中巻の 2/3，下巻の一部）は日本での現行高校数学の内容である．これまで本欄に取り上げられた専門書とは異質なので，その紹介は個々の内容よりも，扱い方や題材の特長に重点を置くようにする．

全巻が黒赤の 2 色刷りで重要事項は赤地であり，ほぼ毎ページに豊富な図がある．但しいくつかの章末にあるコラム欄は，内容はいずれもすごく面白いのだが，赤地に印刷されており，私の眼には刺激的すぎて読みづらかった（性急に読むなという配慮？）．

上巻冒頭のはしがきでは，変化の数学とされる微積分学が単に自然界の記述言語というだけでなく，直接に制御できない変数と制御できる変数との関連を数量的に理解し，それにより状況を予測して統制できる力を得るのに有用という見解を強調している．続く「現在の微積分学」は，原著の初版（1970 年代）当時の多量データ処理や計算理学の話題であり，原著改訂版では削除されたが，訳書では残した旨の注記がある．

第 1 章だけで 100 ページという丁寧な記述だが，章末のコラム欄では関数の反復を論じ，極限・逐次近似・カオスなどへの導入を計っている．第 2 章の終りの方で ε-δ 論法を導入しているが，真に必要な個所にしか使用していない．第 4 章は関数の増減・極値・凸性などの扱いである．なお全般的にコンピュータによるグラフィックスや数式処理（CAS）の使用を当然の前提としており，演習問題でもその指示が見受けられる．

中巻は主として積分法である．第 6 章は面積・体積・曲線の長さ・回転面の曲面積の他，力学での仕事・圧力などが対象である．第 8 章末で数値積分（シンプソンの公式）に触れ，第 9 章で微分方程式の方向場と関連して数値解法のオイラー法に言及しているが，いずれも深入りしてはいない．

下巻の第 11 章には「いろいろな曲線」，特に円錐曲線とその標準形の詳しい記述がある．第 12 章は 3 次元の線型代数であり，行列式・ベクトル積・2 次曲面などを扱う．他の大凡の内容は前出の目次から推察できるだろう．

応用は力学が中心だが工学関連も多く，ベクトル解

析の章では電磁気学にも触れる．第 9 章では炭素 14 年代測定法と実例（トリノの聖骸布の真偽鑑定）も扱っている．演習問題の中には多様の実社会データに関する興味深いものが多いし脚色もうまい．

本書の記述で特に有用な部分は，「よくある質問」に対する細かい注意と，脚注にある著名数学者（特にその名が術語に使われた人物）の小伝である．他に「読者へ」という題の指示もある．一例を挙げれば（上巻 p.127），分母分子に共通項があって約分できる有理関数の，分母（約分できる項）の零点 a への極限値を求めるのに，約分して $x=a$ とおいてよいこと（正しいが説明を要する）の解説である．無条件で $0\cdot\infty=0$ とか $\sin^{-1}(\sin x)=x$ としては不可といった注意も，初心者の誤り易い点だろう．上巻付録では，積の極限値 $\lim[f(x)\cdot g(x)]=\lim f(x)\cdot\lim g(x)$ を ε-δ 論法で 1 ページ近くを費して証明し，難しく感じても不安にならずアイディアと技法を理解せよと述べている．

このように説明は極めて丁寧だが，それに「溺れる」ことがないように要点を学習してゆくべきだろう．

理論の展開はオーソドックスな古典的筋道に徹しており，現在の「理論派」には不満があるかもしれないが，まずは伝統的な標準理論を身につけることが先決であろう．例えば定積分（面積による）と逆微分（不定積分；原始関数）とを別個に扱い，両者の関連を微積分学の基本定理として押さえ，その応用例として対数関数を指数関数の逆関数として導入してその微分法を論じた後，改めて $1/x$ の原始関数として再構成を計るなど，見習いたい工夫も少なくない．

本書を読んで老人の評者は学生時代に学習した旧制高等学校理科の数学教科書を思い起こした．現在では意欲ある高校生・高専の学生・微積分再学習を目指す社会人などに絶好の教科書かもしれない（もちろん本命の大学生にも）．残念ながら現在の日本でこれだけの教科書を編集するには，相当大規模なグループによるかなりの年月の活動が不可欠であり，実質的に「不可能」なのかもしれないという気がした．

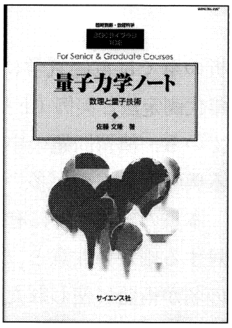
演習問題で使用されている単位系が必ずしもメートル法でなく，ヤードポンド法による単位のものなども混在しているが，異種の単位系だと割り切って特に学習の障害にはならないであろう．微積分学を教える立場の先生方も，その論旨に不満を感ずる部分があっても，一度は眼を通す価値があるように思う．

一　松　信（京都大学名誉教授）

BOOK REVIEW

量子力学ノート
数理と量子技術

佐藤文隆著，B5 判，168 頁，本体 2238 円，サイエンス社



私の伯父に熟練した木工職人がいる．その伯父が同じ木工の修行を始めた私を自分の工房に呼び寄せ，どのように家具や建具を作り上げるのか，その作業を目前で見せてくれたことがある．伯父の家に泊まり込んだ数日の間，朝から晩まで，私は伯父からいろいろな作品の意匠と工法を直に聞き，彼の仕事ぶりを細かく観察した．伯父は作業に倦むと，暫し木工の歴史や彼自身の木工に対する思い入れを語った．鉋屑が散乱する工房の中で，小奇麗に整頓された工具棚に，今まで見たこともない鉋や鑿が鈍い光を放っていた．むろん，短い間に私が伯父の仕事をすっかり覚えることなどできようもないし，伯父もそんなことは承知の上である．ただ伯父のしたかったことは，私に木工職人の掛け値無い素の姿を見せることであった．伯父は私に自分のようなプロになれと言っているわけではない．ただ木工職人の世界というものを私に知らせておきたかった．木工の奥深さと魅力を，伯父の感じたままに伝えておきたかったのである．

この『量子力学ノート』と題する本は，そんな本である．もちろん，木工とは量子力学のことであって，著者自身も言うように，本書は量子力学の入門書ではなく，既習者の「学び直し」を目的として作られている．これが著者の行った量子力学特論の講義ノートと配布資料を下敷にして執筆されたことは，読めば随所に覗うことができる．普通の教科書と違い，文言や数式を着実に辿れば理解が進むといった類のものではないが，もしそのようなものであったならば，これだけの豊富な内容をコンパクトに詰め込んで提供することはできなかったことも確かだろう．数日間の木工実習を，手取り足取り教わったのでは，小さな棚や椅子しか作れるようにならない．実際，本書には，量子力学の数理的な形式や角運動量，対称性の表現といった標準的内容から，量子測定理論，量子状態の制御，EPR パラドックスやベル不等式といった量子基礎論，さらには量子計算や量子暗号の話題まで含まれている．木彫技巧を極めた大型家具といった現代木工技術の枠にまで，一気に話しておきたいという伯父の熱意である．作業の手を休めたときの伯父の雑談は，数多くのコラムとして本書全体に鏤められている．

著者は我が国における一般相対論と宇宙物理学の大御所であり，それを一介の木工職人に例えるのは失礼かも知れない．しかし相対論を作ったアインシュタインは，同時に量子力学の草創期の大立者の一人であり，彼の EPR 論文の影響は，ベルの非局所相関に関する深い考察を通して，遠く現代の量子情報科学にも及んでいる．そしてそのアインシュタインは，量子力学の示唆する局所性や実在性に対する疑念から，波動関数の解釈を巡ってボーアらコペンハーゲン主流派と公然と対立した．彼の一般相対論を発展させ，量子重力の研究でも顕著な業績を残したホィーラーは，後年，アインシュタインが疑問とした量子力学の基礎に考えを巡らせ，彼の膝元から多くの量子情報科学の先駆者を輩出した．著者はそのホィーラーの「追っかけ」を自任し，文字通りホィーラーの跡を追って量子力学の基礎と情報の問題に取り組んでいる．熟練の木工職人になぞらえた所以である．

本書には，量子的な干渉効果に対する見方や，量子力学における測定の能動的な役割などについて，著者ならではの考え方が提示されている．量子力学の基礎や量子情報理論に関わる事柄を，様々な物理の具体例を通して語る展開部の最後の 4 つの章は，その特徴が著しい．観測・測定が理論構成の中核をなす量子力学は，実存的存在論の傾向を有していると著者は説く．それでいながら，使える「数理ツール」としての側面に飽き足らず，記述対象が何であるかという「実在」について思い悩むのが物理であって，著者自身，その周辺をめぐって逡巡するのを包み隠さない．

ホィーラーは晩年のインタビューで，「私を苦しめる最大の未解決問題は量子の問題だ．私は今なお，アインシュタインが友人のベッソに手紙で述べた，量子の重要性は極めて大きく，皆がそれに取り掛かるべきだという言葉を考え続けている」と答えている．本書の著者の態度もこれと同じだと思われる．そしてこれに賛同される諸子に，本書を薦めたい．

筒井　泉（高エネルギー加速器研究機構・素粒子原子核研究所）

「数理科学」は語る

30年前から現代へのメッセージ

坂井　公

1984年11月号

30年前の本誌の特集は「応用論理」だった．考えてみれば，奇妙な言葉かもしれない．応用××と言う場合，何らかの形でそれが実用的な用途に役に立つというイメージが喚起される．ところが応用論理という場合，それがどういう風な実用性を持ち得るかを想像することは，たやすくないような気がする．もちろん，論理が役に立たないということではない．もろもろの考え方を整理したり，多くの学問で推論を進めたりする上で，論理的であることは不可欠である．しかし，それは，学問などに従事する人は論理的でなければならないということであって，論理学を学んだからといって人は論理的になれるわけではない．



ところが，このときの応用論理は，確かにある実用イメージをもって論理学が語られていたような気がする．おそらく，その背景に当時の日本では第5世代コンピュータ計画というものが進行中であって，その中核技術として論理プログラミングを採用したということがあっただろう．いまさら説明するまでもないが，論理プログラミングとは，論理式の変換を核にして動作するプログラミング原理で，当時はまだ目新しく，確かに論理学を応用している側面があった．当時の筆者の記事を改めて読み返してみると，若かったせいでずいぶんと気負いが感じられ，いささか恥ずかしくなる部分もあるが，それまで，中心的だった手続き型や関数型のプログラミングに対峙させるものとしては大変魅力的だったとはいえる．

30年の時間の流れは，予測不可能だったものをたくさん生み出した．情報技術でもそうで，例えば，携帯電話とかインターネットがこんなに普及しようとは全く想像できなかった．しかし，もちろん従来型のコンピュータもこれらを取り込むようにして盛んに使われている．プログラミングの世界でも同じで，論理型が手続き型を席巻するというようなことは起こらず，Cはいまだ健在である．だが，もちろん旧態依然ということでもなく，オブジェクト指向など新しい技術を取り入れながら進化し続けている．一方，論理プログラミング言語 Prolog もまだ使われているし，その特長であったパターンマッチという機構は，Haskell などの関数型を含めた多くの後継言語の中で重要な技術となっている．

生物の進化もそうだが，このようにして，古いシステムの良いところを残しながら，新しい技術によって次々と小さな変貌を繰り返して行くことで，やがて全く新しいものが生まれてくるのかもしれない．

（さかい・こう，筑波大学数理物質系）

例題形式で探求する微積分学の基本定理
関数の性質から幾何構造を探る
第12回

曲面について(1)

森 田　茂 之

今回から，$\mathbb{R}^3$ の中の曲面の曲がり具合を考える．19 世紀前半（1827 年）に登場したガウスの**曲面論**への入門的な内容である．具体的には**ガウス曲率**と**ガウス写像**を取り上げる．接平面からの高さ関数の微分によって曲面の曲がり具合が計られたり，あるいは単位球面が曲がり具合の "物差し" の役割を果たすことを具体例によって観察する．今回以降の内容については，追加の参考文献として 1) を挙げておく．

12.1 第一基本形式

まず，本連載の第 8 回目で取り上げた $\mathbb{R}^3$ の中の曲面の局所座標の考え方の復習から始める．図 12.1 のように uv 平面上の開集合 U から，xyz 空間すなわち $\mathbb{R}^3$ の中の曲面 S の開集合 V への 1 対 1 写像が

$$x = x(u, v), \quad y = y(u, v), \quad z = z(u, v)$$

の形で与えられていて，条件

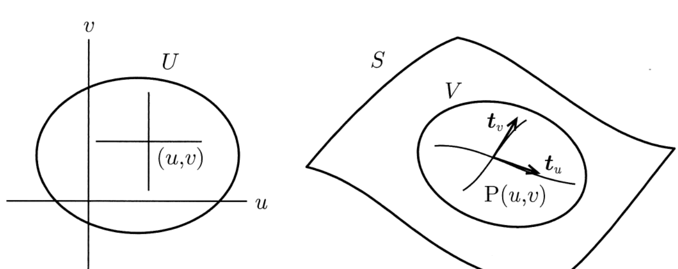


図 12.1　局所座標と接ベクトル．

$$\operatorname{rank}\begin{pmatrix} x_u & y_u & z_u \\ x_v & y_v & z_v \end{pmatrix} = 2 \tag{12.1}$$

が満たされているとする．このような場合，(u,v) を V 上の**局所座標**（local coordinates）と呼ぶのであった．V 上の各点は $\mathrm{P}(x(u,v),y(u,v),z(u,v))$ と表示できるが，簡単のためにこれを $\mathrm{P}(u,v)$ と記すこともできる．さて，点 $\mathrm{P}(u,v)$ における曲面 S への接平面を T_{P} としよう．上記の (12.1) の行列の 2 つの行ベクトル

$$\boldsymbol{t}_u = (x_u, y_u, z_u),$$
$$\boldsymbol{t}_v = (x_v, y_v, z_v)$$

を P を始点とする幾何的なベクトルと思えば，それらは S に接している．すなわち，$\boldsymbol{t}_u, \boldsymbol{t}_v \in T_{\mathrm{P}}$ となる．ここで，T_{P} は P を始点とし S に接するベクトル全体のなす 2 次元の実ベクトル空間として理解している．そして条件 (12.1) は $\boldsymbol{t}_u, \boldsymbol{t}_v$ が T_{P} の基底となることと同値な条件である．さらに，P における S への長さ 1 の法線ベクトル $\boldsymbol{n}$ は

$$\boldsymbol{n} = \frac{\boldsymbol{t}_u \times \boldsymbol{t}_v}{|\boldsymbol{t}_u \times \boldsymbol{t}_v|}$$

により与えられることになる．ただし $\boldsymbol{t}_u, \boldsymbol{t}_v, \boldsymbol{n}$ が正の向きとなるように取っている．

さて，任意の接ベクトル $\boldsymbol{x} \in T_{\mathrm{P}}$ は

$$\boldsymbol{x} = \alpha \boldsymbol{t}_u + \beta \boldsymbol{t}_v \quad (\alpha, \beta \in \mathbb{R})$$

と一意的に表すことができる．したがって，その長さの 2 乗は

$$\begin{aligned} |\boldsymbol{x}|^2 &= (\boldsymbol{x}, \boldsymbol{x}) \\ &= (\alpha \boldsymbol{t}_u + \beta \boldsymbol{t}_v, \alpha \boldsymbol{t}_u + \beta \boldsymbol{t}_v) \\ &= \alpha^2 |\boldsymbol{t}_u|^2 + 2\alpha\beta(\boldsymbol{t}_u, \boldsymbol{t}_v) + \beta^2 |\boldsymbol{t}_v|^2 \end{aligned}$$

となる．そこで，これも本連載の第 8 回目ですでに記したように，3 つの関数 E, F, G を

$$E = (\boldsymbol{t}_u, \boldsymbol{t}_u) = |\boldsymbol{t}_u|^2, \quad F = (\boldsymbol{t}_u, \boldsymbol{t}_v), \quad G = (\boldsymbol{t}_v, \boldsymbol{t}_v) = |\boldsymbol{t}_v|^2$$

により定義すれば，$\boldsymbol{x}$ の長さは

$$\begin{aligned} |\boldsymbol{x}|^2 &= E\alpha^2 + 2F\alpha\beta + G\beta^2 \\ &= \begin{pmatrix} \alpha & \beta \end{pmatrix} \begin{pmatrix} E & F \\ F & G \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \alpha \\ \beta \end{pmatrix} \end{aligned}$$

と表される．これは α, β に関する斉次の二次式であり，二次形式と呼ばれるものである．曲面 S から見たとき，この二次形式を局所座標 u, v に関する**第一基本形式**（first fundamental form）という．そして E, F, G をその係数，それらを成分とする上記の行列を係数行列と呼ぶ．この行列は正値対称行列であり，とくにその行列式 $EG - F^2$ は正の値をとる．

例題 12.1 $\mathbb{R}^3$ の原点を中心とする半径 r の球面

$$S_r = \{(x, y, z) \in \mathbb{R}^3; x^2 + y^2 + z^2 = r^2\}$$

において，局所座標を

$$x = u, \quad y = v, \quad z = \sqrt{r^2 - x^2 - y^2}$$

により定義する．この局所座標に関する第一基本形式を計算せよ．

解答 接ベクトルを計算すると

$$\boldsymbol{t}_u = \left(1, 0, -\frac{u}{\sqrt{r^2 - x^2 - y^2}}\right),$$

$$\boldsymbol{t}_v = \left(0, 1, -\frac{v}{\sqrt{r^2 - x^2 - y^2}}\right)$$

となる．したがって

$$E = (\boldsymbol{t}_u, \boldsymbol{t}_u) = 1 + \frac{u^2}{r^2 - u^2 - v^2},$$

$$F = (\boldsymbol{t}_u, \boldsymbol{t}_v) = \frac{uv}{r^2 - u^2 - v^2},$$

$$G = (\boldsymbol{t}_v, \boldsymbol{t}_v) = 1 + \frac{v^2}{r^2 - u^2 - v^2}$$

となる．

例題 12.2 一葉双曲面と呼ばれる曲面

$$S = \{(x, y, z) \in \mathbb{R}^3; x^2 + y^2 - z^2 = 1\}$$

の概形を描け．次に，この曲面の局所座標を

$$x = \cosh u \cos v, \quad y = \cosh u \sin v, \quad z = \sinh u$$

により定義する．ただし，念のために書いておくと $\cosh u, \sinh u$ は

$$\cosh u = \frac{e^u + e^{-u}}{2}, \quad \sinh u = \frac{e^u - e^{-u}}{2}$$

により定義され，双曲線関数と呼ばれる．この局所座標に関する第一基本形式を計算せよ．

解答 まず一葉双曲面の概形は図 12.2 のようになる．接ベクトルを計算すると

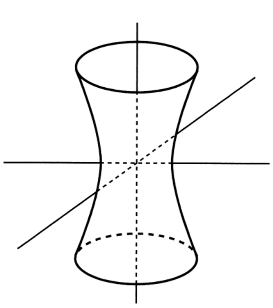


図 12.2 一葉双曲面.

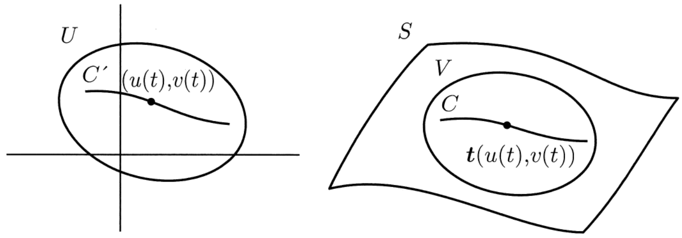


図 12.3　曲面上の曲線の長さ.

$$\boldsymbol{t}_u = (\sinh u \cos v, \sinh u \sin v, \cosh u),$$
$$\boldsymbol{t}_v = (-\cosh u \sin v, \cosh u \cos v, 0)$$

となる．したがって

$$E=(\boldsymbol{t}_u, \boldsymbol{t}_u)=\sinh^2 u \cos^2 v + \sinh^2 u \sin^2 v + \cosh^2 u = \sinh^2 u + \cosh^2 u,$$
$$F=(\boldsymbol{t}_u, \boldsymbol{t}_v)=0,$$
$$G=(\boldsymbol{t}_v, \boldsymbol{t}_v)=\cosh^2 u \sin^2 v + \cosh^2 u \cos^2 v = \cosh^2 u$$

となる．

次に，曲面上の曲線の長さを考察しよう．図 12.3 を見ていただきたい．局所座標である u, v が有効な曲面 S 上の区域 V 上に，曲線 C が与えられているものとし，対応する uv 平面上の曲線を C' とする．C' 上の点を適当なパラメータ t を用いることにより $(u(t), v(t))$ と表示すれば，元の曲線 C 上の対応する点は，3 次元ベクトル

$$\boldsymbol{t}(u(t), v(t)) = (x(u(t), v(t)), y(u(t), v(t)), z(u(t), v(t))) \in S \subset \mathbb{R}^3$$

により表示される．このとき t に関する速度ベクトルは

$$\begin{aligned}\frac{d\boldsymbol{t}}{dt} &= \frac{\partial \boldsymbol{t}}{\partial u}\frac{du}{dt} + \frac{\partial \boldsymbol{t}}{\partial v}\frac{dv}{dt} \\ &= \boldsymbol{t}_u \frac{du}{dt} + \boldsymbol{t}_v \frac{dv}{dt}\end{aligned}$$

となる．ここで $\boldsymbol{t}_u, \boldsymbol{t}_v$ は点 $\boldsymbol{t}(u(t), v(t))$ における曲面 S への接平面 $T_{\boldsymbol{t}(u(t),v(t))}$ の上記で与えた基底である．したがって速さ（すなわち速度ベクトルの長さ）の 2 乗は

$$\left|\frac{d\boldsymbol{t}}{dt}\right|^2 = E\left(\frac{du}{dt}\right)^2 + 2F\left(\frac{du}{dt}\right)\left(\frac{dv}{dt}\right) + G\left(\frac{dv}{dt}\right)^2$$

と書ける．こうして，曲面 S 上の曲線 C の $t_0 \leq t \leq t_1$ の部分の長さを与える次の公式が導かれる．

公式 12.1（曲面上の曲線の長さ）

$$l(C) = \int_{t_0}^{t_1} \sqrt{E\left(\frac{du}{dt}\right)^2 + 2F\left(\frac{du}{dt}\right)\left(\frac{dv}{dt}\right) + G\left(\frac{dv}{dt}\right)^2}\, dt$$

例題 12.3 曲面

$$S = \{(x, y, z) \in \mathbb{R}^3; z = xy\}$$

上の曲線

$$C = \{(x, x, x^2) \in S; -1 \leq x \leq 1\}$$

の長さを求めよ．

解答 局所座標として

$$x = u, \quad y = v, \quad z = uv$$

を採用すれば

$$\boldsymbol{t}_u = (1, 0, v), \quad \boldsymbol{t}_v = (0, 1, u)$$

であるから，第一基本形式は

$$E = 1 + v^2, \quad F = uv, \quad G = 1 + u^2$$

となる．したがって，公式 12.1 を適用することにより

$$\begin{aligned} l(C) &= \int_{-1}^{1} \sqrt{(1+t^2)\cdot 1 + 2t^2 + 1 + t^2}\, dt \\ &= \int_{-1}^{1} \sqrt{4t^2+2}\, dt = 2\int_{0}^{1} \sqrt{4t^2+2}\, dt \end{aligned}$$

が得られる．ここで $t = \frac{1}{\sqrt{2}}x$ を代入し，不定積分の公式

$$\int \sqrt{x^2+1}\, dx = \frac{1}{2}\left(x\sqrt{x^2+1} + \log\left|x + \sqrt{x^2+1}\right|\right)$$

を使えば，求める答え

$$l(C) = \left[x\sqrt{x^2+1} + \log\left|x + \sqrt{x^2+1}\right|\right]_0^{\sqrt{2}} = \sqrt{6} + \log\left(\sqrt{2} + \sqrt{3}\right)$$

が得られる．

12.2 第二基本形式

次に曲面の曲がり具合を眼に見える形で記述する，**第二基本形式**（second fundamental form）と呼ばれる概念を導入する．引き続き前節と同じ設定で考える．図 12.4 を見ていただきたい．局所座標 (u, v) が有効な S 上の区域 V の任意の点 $\mathrm{P}_0(u_0, v_0) \in V$ を取り，その点における接平面を T_{P_0}，法線ベクトルを $\boldsymbol{n}_0$ とする．このとき曲面 S の点 P_0 の近くの形状は，T_{P_0} と S との位置関係によって完全に記述することができる．具体的には次のようにすればよい．点 P_0 の十分近くの任意の点 $\mathrm{P}(u, v)$ に対して，P から T_{P_0} に降ろした垂線の長さ $h(\mathrm{P})$ は 2 変数 u, v の関数と考えることができる．したがって，$h(\mathrm{P}) = h(u, v)$ と記すことができる．ただし，P が T_{P_0} に関して $\boldsymbol{n}_0$ と同じ側にあるときは $h(\mathrm{P}) > 0$ とするが，反対側にあるときは $h(\mathrm{P}) < 0$ とする．

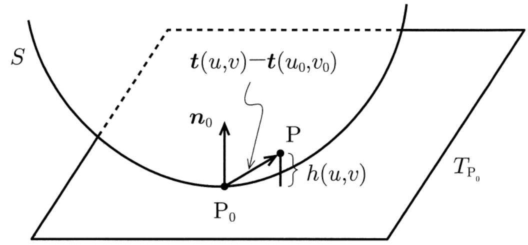


図 12.4　接平面からの高さ関数.

もちろん P が T_{P_0} 上にあるときは $h(\mathrm{P})=0$ である．簡単に言えば，h は接平面 T_{P_0} からの “高さ関数” である．そして曲面 S は，点 $\mathrm{P}(u_0,v_0)$ の近くではこの関数のグラフとして現れるのである．

さて点 $\mathrm{P}(u,v)$ の位置ベクトルを $\boldsymbol{t}(u,v)$ とすれば

$$h(u,v)=(\boldsymbol{n}_0,\boldsymbol{t}(u,v)-\boldsymbol{t}(u_0,v_0))$$

となる．したがって，$h(u,v)$ の点 $(u_0,v_0)\in U$ における偏微係数は

$$h_u(u_0,v_0)=(\boldsymbol{n}_0,\boldsymbol{t}_u(u_0,v_0))=0,$$
$$h_v(u_0,v_0)=(\boldsymbol{n}_0,\boldsymbol{t}_v(u_0,v_0))=0$$

と計算される．ここで上の 2 つの式の後ろの等式は，2 つのベクトル $\boldsymbol{t}_u(u_0,v_0)$, $\boldsymbol{t}_v(u_0,v_0)$ はいずれも点 $\mathrm{P}(u_0,v_0)$ における S への接ベクトルであるから，$\boldsymbol{n}_0$ と直交することによる．したがって，3 つの実数 L,M,N を h の 2 階の偏微係数を使って

$$L=h_{uu}(u_0,v_0)=(\boldsymbol{n}_0,\boldsymbol{t}_{uu}(u_0,v_0)),$$
$$M=h_{uv}(u_0,v_0)=(\boldsymbol{n}_0,\boldsymbol{t}_{uv}(u_0,v_0)),$$
$$N=h_{vv}(u_0,v_0)=(\boldsymbol{n}_0,\boldsymbol{t}_{vv}(u_0,v_0))$$

により定義すれば，関数 h の (u_0,v_0) におけるテイラー展開は

$$\begin{aligned}h(u,v)&=\frac{1}{2}\{(u-u_0)^2h_{uu}(u_0,v_0)+2(u-u_0)(v-v_0)h_{uv}(u_0,v_0)\\&\qquad+(v-v_0)^2h_{vv}(u_0,v_0)\}+\text{高次の項}\\&=\frac{1}{2}\{L(u-u_0)^2+2M(u-u_0)(v-v_0)+N(v-v_0)^2\}+\text{高次の項}\end{aligned}$$

で与えられる．高さ関数のこの 2 次の部分の判別式は M^2-LN であるから，その符号によって関数の増減の具合が判定できる．そして，曲面の曲がり具合は定性的に次の 3 種類に分類できることが分かる．

(i) $M^2-LN<0$ の場合：曲面は図 12.5 の (i) のような曲がり具合である．

(ii) $M^2-LN>0$ の場合：曲面は図 12.5 の (ii) のような曲がり具合である．

(iii) $M^2-LN=0$ の場合：(i), (ii) 以外の曲がり方で，例えば図 12.5 の (iii) のような曲がり具合である．

これらの曲がり具合をした点をそれぞれ

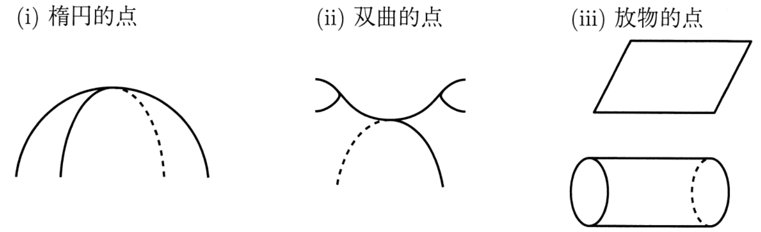


図 12.5　曲面の曲がり具合の定性的分類.

(i) $M^2 - LN < 0$ の場合：**楕円的点**（elliptic point），

(ii) $M^2 - LN > 0$ の場合：**双曲的点**（hyperbolic point），

(iii) $M^2 - LN = 0$ の場合：**放物的点**（parabolic point）

という.

上記において，パラメータ (u_0, v_0) を一般の (u, v) に置き換えれば，L, M, N は u, v に関する関数となる．そして各点 $\mathrm{P}(u, v)$ おける接ベクトル全体のなすベクトル空間 T_P 上の二次形式が

$$L\alpha^2 + 2M\alpha\beta + N\beta^2 = \begin{pmatrix}\alpha & \beta\end{pmatrix}\begin{pmatrix}L & M \\ M & N\end{pmatrix}\begin{pmatrix}\alpha \\ \beta\end{pmatrix} \qquad (\boldsymbol{x} = \alpha\boldsymbol{t}_u + \beta\boldsymbol{t}_v \in T_{\mathrm{P}(u,v)})$$

により定義される．これを曲面 S の局所座標 (u, v) に関する**第二基本形式**（second fundamental form）という．その係数行列の行列式は $LN - M^2$ であり，上記のようにその符号が曲面の曲がり具合の定性的分類を与えることになる.

次は例題 12.1 の続きの問題である.

> **例題 12.4**　$\mathbb{R}^3$ の原点を中心とする半径 r の球面
>
> $$S_r = \{(x, y, z) \in \mathbb{R}^3; x^2 + y^2 + z^2 = r^2\}$$
>
> において，局所座標を
>
> $$x = u, \quad y = v, \quad z = \sqrt{r^2 - x^2 - y^2}$$
>
> により定義する．この局所座標に関する第二基本形式を計算せよ．またその係数行列の行列式を求めよ.

解答　接ベクトルは例題 12.1 ですでに計算して

$$\boldsymbol{t}_u = \left(1, 0, -\frac{u}{\sqrt{r^2 - x^2 - y^2}}\right), \quad \boldsymbol{t}_v = \left(0, 1, -\frac{v}{\sqrt{r^2 - x^2 - y^2}}\right)$$

であった．したがって

$$\boldsymbol{t}_{uu} = \left(0, 0, -\frac{1}{\sqrt{r^2 - u^2 - v^2}} - \frac{u^2}{(r^2 - u^2 - v^2)\sqrt{r^2 - u^2 - v^2}}\right),$$

$$\boldsymbol{t}_{uv} = \left(0, 0, -\frac{uv}{(r^2 - u^2 - v^2)\sqrt{r^2 - u^2 - v^2}}\right),$$

$$\boldsymbol{t}_{vv} = \left(0, 0, -\frac{1}{\sqrt{r^2 - u^2 - v^2}} - \frac{v^2}{(r^2 - u^2 - v^2)\sqrt{r^2 - u^2 - v^2}}\right)$$

となる．

一方，法線ベクトルは簡単な考察から

$$\boldsymbol{n} = \frac{1}{r}(x, y, z) = \frac{1}{r}(u, v, \sqrt{r^2 - u^2 - v^2})$$

となることが分かる．したがって，求める二次形式は

$$L = (\boldsymbol{n}, \boldsymbol{t}_{uu}) = -\frac{1}{r} - \frac{u^2}{r(r^2 - u^2 - v^2)},$$
$$M = (\boldsymbol{n}, \boldsymbol{t}_{uv}) = -\frac{uv}{r(r^2 - u^2 - v^2)},$$
$$N = (\boldsymbol{n}, \boldsymbol{t}_{vv}) = -\frac{1}{r} - \frac{v^2}{r(r^2 - u^2 - v^2)}$$

で与えられる．また，係数行列の行列式は

$$LN - M^2 = \frac{1}{r^2 - u^2 - v^2} > 0$$

となる．当然予想されるように楕円的点であることが確認された．

次は例題 12.3 の続きの問題である．

例題 12.5　曲面

$$S = \{(x, y, z) \in \mathbb{R}^3; z = xy\}$$

の，局所座標 $x = u, y = v, z = uv$ に関する第二基本形式を計算せよ．またその係数行列の行列式を求めよ．

解答　例題 12.3 の解答から

$$\boldsymbol{t}_{uu} = (0, 0, 0), \quad \boldsymbol{t}_{uv} = (0, 0, 1), \quad \boldsymbol{t}_{vv} = (0, 0, 0)$$

となる．次に法線ベクトルは簡単な計算から

$$\boldsymbol{n} = \left(-\frac{v}{\sqrt{1 + u^2 + v^2}}, -\frac{u}{\sqrt{1 + u^2 + v^2}}, \frac{1}{\sqrt{1 + u^2 + v^2}} \right)$$

となることが分かる．したがって，求める第二基本形式は

$$L = 0, \quad M = \frac{1}{\sqrt{1 + u^2 + v^2}}, \quad N = 0$$

となり，係数行列の行列式は $LN - M^2 = -\frac{1}{1+u^2+v^2} < 0$ となる．こうして，すべての点が双曲的点であることが分かった．

参考文献

1)　小林昭七，『曲線と曲面の微分幾何』，改訂版，裳華房，1995.

（もりた・しげゆき，東京大学・東京工業大学名誉教授）

微分方程式を考える

第4回 数学は現象をいかに記述しているか

常微分方程式の初期値問題の局所解

小 澤 徹

常微分方程式の初期値問題の解の存在について，時間変数に関し局所的な枠組みで考える．解の存在を保証する数学的基礎概念として，完備性と点列コンパクト性に焦点を当てて議論する．

4.1 バナッハの不動点定理

完備性に基づく不動点定理は数多く知られているが，次の**バナッハの不動点定理**が最も基本的であろう．

> **定理 4.1** (X,d) を空でない完備距離空間とし，f を X からそれ自身への縮小写像とする．即ち $0 \leq a < 1$ なる $a \in \mathbb{R}$ が存在し，任意の $x, y \in X$ について不等式 $d(f(x), f(y)) \leq ad(x,y)$ が成立しているものとする．このとき f は唯一つの不動点を持つ．即ち $f(x_0) = x_0$ なる $x_0 \in X$ が唯一つ存在する．

(パレによる証明)[5] 任意の $x_1, x_2 \in X$ に対し，三角不等式より

$$d(x_1, x_2) \leq d(x_1, f(x_1)) + d(f(x_1), f(x_2)) + d(f(x_2), x_2)$$

を得るので f の縮小性より不等式

$$d(x_1, x_2) \leq \frac{1}{1-a}(d(x_1, f(x_1)) + d(x_2, f(x_2)))$$

が従う．これより不動点の一意性が従う．任意の $x \in X$，$m, n \geq 1$ に対し $x_1 = f^m(x)$, $x_2 = f^n(x)$ として，この不等式を適用すれば

$$\begin{aligned} d(f^m(x), f^n(x)) &\leq \frac{1}{1-a}(d(f^m(x), f^m(f(x))) + d(f^n(x), f^n(f(x)))) \\ &\leq \frac{1}{1-a}(a^m + a^n)d(x, f(x)) \end{aligned}$$

を得るので $(f^n(x); n \geq 1)$ は X のコーシー列をなす．その極限を x_0 とすると $d(x_0, f(x_0)) \leq d(x_0, f^n(x)) + d(f^n(x), f(x_0)) \leq d(x_0, f^n(x)) + ad(f^{n-1}(x), x_0) \to 0 \ (n \to \infty)$ より f の不動点であることが分かる．

方程式 $x = f(x)$ の解を逐次代入法 $x_n = f(x_{n-1})$ による近似解の極限として構成する方法論を強調する場合，定理 4.1 はその考案者に因んで**ピカルの逐次代入法**（Picard's iteration）ということがある（ちなみにフランスでは専らこの名称を用いる．イタリアでは定理 4.1 をカチョッポリ（Caccioppoli）の定理と称する）．量子物理におけるボルン近似やダイソン級数も同一の考え方を取っており大層興味深い．バナッハの不動点定理の応用は幅広い．応用に際しては，集合 X，距離 d，縮小写像 f の取り方が決定的となる．

4.2 常微分方程式の初期値問題—完備性に基づく解法—

X を $\{0\}$ でないバナッハ空間とし $t_0 \in \mathbb{R}$ および $u_0 \in X$ を固定する．$a, b > 0$ に対し積空間 $\mathbb{R} \times X$ の有界閉集合 D を

$$D = [t_0, t_0 + a] \times \overline{B(u_0; b)} = \{(t, u) \in \mathbb{R} \times X; t_0 \leq t \leq t_0 + a, \|u - u_0\| \leq b\}$$

と定める．D 上定義された写像 $f : D \to X$ による相速度ベクトル場（vector field of phase velocity）に従う相点の運動方程式（equation of phase motion）

$$u'(t) = f(t, u(t)) \tag{4.1}$$

を初期時刻 t_0 における初期条件 $u(t_0) = u_0$ の下で考える．$\mathbb{R} \times X$ の部分集合 E 上定義された写像 $f : E \to X$ は**リプシッツ条件**（Lipschitz condition）を満たすとは定数 $L > 0$ が存在し任意の $(t, u), (t, v) \in E$ に対し不等式

$$\|f(t, u) - f(t, v)\| \leq L\|u - v\|$$

が満たされることをいい，L をリプシッツ定数（Lipschitz constant）と称する．

定理 4.2　写像 $f : D \to X$ はリプシッツ条件を満たす有界な連続写像とし $I = [t_0, t_0 + T]$, $T = \min(a, b/M)$, $M = \sup\{\|f(t, u)\|; t \in D\}$ と置く．このとき $u \in C^1(I; X)$ が存在し，$u(t_0) = u_0, \{t, u(t); t \in I\} \subset D$，かつ方程式 (4.1) を任意の $t \in I$ に対し満たす．このような u は I 上，一意的である．

（証明）　任意の $\varepsilon > 0$ および $u \in C(I; X)$ に対し

$$|||u|||_\varepsilon = \sup_{t \in I} e^{-(1+\varepsilon)L(t-t_0)} \|u(t)\|$$

とすると $C(I; X)$ はバナッハ空間となり，その部分集合

$$\mathscr{F} = \{u \in C(I; X); \ \sup_{t \in I} \|u(t) - u_0\| \leq b\}$$

は閉集合となる．$u \in \mathscr{F}$ に対し $\Phi(u) : I \to X$ を

$$(\Phi(u))(t) = u_0 + \int_{t_0}^{t} f(t', u(t'))dt',\ t \in I$$

で定めると $\Phi(u) \in \mathscr{F}$ となる．即ち $\Phi : u \mapsto \Phi(u)$ は $\mathscr{F}$ からそれ自身への写像となる．実際，$u \in \mathscr{F}, t \in I$ に対し $(t, u(t)) \in D$ であるから不等式

$$\|(\Phi(u))(t) - (\Phi(u))(s)\| = \left\| \int_{s}^{t} f(t', u(t'))dt' \right\| \le M|t - s|$$

により $\Phi(u)$ の連続性が従う．さらに

$$\|(\Phi(u))(t) - u_0\| = \left\| \int_{t_0}^{t} f(t', u(t'))dt' \right\| \le M(t - t_0) \le MT \le b$$

により $\Phi(u) \in \mathscr{F}$ が従う．$u, v \in \mathscr{F}$, $t \in I$ に対し等式

$$(\Phi(u))(t) - (\Phi(v))(t) = \int_{t_0}^{t} (f(t', u(t')) - f(t', v(t')))dt'$$

が成立するので，リプシッツ条件およびノルム $|||\cdot|||_\varepsilon$ の定義を用いると

$$\begin{aligned}
\|(\Phi(u) - \Phi(v))(t)\| &\le \int_{t_0}^{t} \|f(t', u(t')) - f(t', v(t'))\|dt' \\
&\le L \int_{t_0}^{t} \|u(t') - v(t')\|dt' \\
&\le L \int_{t_0}^{t} e^{(1+\varepsilon)L(t'-t_0)} |||u - v|||_\varepsilon dt' \\
&= \frac{1}{1+\varepsilon}(e^{(1+\varepsilon)L(t-t_0)} - 1)|||u - v|||_\varepsilon
\end{aligned}$$

を得る．これより

$$|||\Phi(u) - \Phi(v)|||_\varepsilon \le \frac{1}{1+\varepsilon}|||u - v|||_\varepsilon$$

が従い Φ は縮小写像となり，$\mathscr{F}$ 内に不動点 u を持つ．u は積分方程式

$$u(t) = u_0 + \int_{t_0}^{t} f(t', u(t'))dt', \quad t \in I$$

を満たす．これより u は $(t_0, t_0 + T)$ 上で微分可能であり (4.1) を満たす．右辺は I 上連続なので $u \in C^1(I; X)$ となる．最後に，一意性を証明しよう．$v \in C^1(I; X)$ は $v(t_0) = u_0$, $v'(t) = f(t, v(t))$, $t \in I$ を満たしているものとする．両辺を積分することにより

$$v(t) = u_0 + \int_{t_0}^{t} f(t', v(t'))dt'$$

を得る．このとき

$$\|u(t) - v(t)\| \le L \int_{t_0}^{t} \|u(t') - v(t')\|dt'$$

となり，グロンウォールの補題より $u = v$ を得る．

4.3 部分列と対角線論法

この節では X を空でない集合とし，X の点列の部分列の捉え方について整理

し，カントールの対角線論法に応用する．X の点列 (sequence) とは写像 $a : \mathbb{Z}_{>0} \to X$ のことである．点列 a の部分列（subsequence）とは狭義単調増加写像 $\varphi : \mathbb{Z}_{>0} \to \mathbb{Z}_{>0}$ との合成写像として定まる点列 $a \circ \varphi : \mathbb{Z}_{>0} \to X$ のことである．通常 $a_n = a(n), n_k = \varphi(k)$ とし a を $(a_n; n \in \mathbb{Z}_{>0}), (a_n)_{n\geq 1}, \{a_n\}_{n\geq 1}$ 等，$a \circ \varphi$ を $(a_{n_k}; k \in \mathbb{Z}_{>0}), (a_{n_k})_{k\geq 1}$ 等と表す．部分列 $a \circ \varphi$ は a の定義域 $\mathbb{Z}_{>0}$ を可算無限集合 $I \equiv \varphi(\mathbb{Z}_{>0})$ に制限した写像 $a|I = (a \circ \varphi) \circ \varphi^{-1} : I \to X$ とみなすこともできる．ここに $\varphi^{-1} : I \to \mathbb{Z}_{>0}$ は φ の値域を制限した写像 $\varphi : \mathbb{Z} \to I$ の逆写像の意味である．逆に，与えられた可算無限集合 $I \subset \mathbb{Z}_{>0}$ に対し，$\varphi(\mathbb{Z}_{>0}) = I$ なる狭義単調増加写像 $\varphi : \mathbb{Z}_{>0} \to \mathbb{Z}_{>0}$ が一意的に存在するので a を I に制限した写像 $a|I : I \to X$ は a の部分列 $a \circ \varphi : \mathbb{Z}_{>0} \to X$ とみなすこともできる．よって部分列の捉え方として，狭義単調増加写像 $\varphi : \mathbb{Z}_{>0} \to \mathbb{Z}_{>0}$ によるものと可算無限集合 $I \subset \mathbb{Z}_{>0}$ によるものとは同値であることが分かった．

カントールの対角線論法（Cantor's diagonal argument）とは，一つの点列から部分列を繰り返し取って行く可算無限回の手続きが与えられているとき，新たに一つの部分列を選んで，それが元々の（有限回の手続きの繰り返しで得られる）どの部分列に対しても（初めの有限個を除いて）その部分列となっているようにできるという主張である．その論法を写像の言葉で捉え直そう．

命題 4.1　各 $m \in \mathbb{Z}_{>0}$ に対し $\varphi_m : \mathbb{Z}_{>0} \to \mathbb{Z}_{>0}$ は狭義単調増加写像であるとする．このとき狭義単調増加写像 $\varphi : \mathbb{Z}_{>0} \to \mathbb{Z}_{>0}$ が存在し，各 $m \in \mathbb{Z}_{>0}$ に対し $l \geq m$ ならば $\varphi(l) \in (\varphi_1 \circ \cdots \circ \varphi_m)(\mathbb{Z}_{>0})$ を満たす．

（証明）　各 $n \in \mathbb{Z}_{>0}$ に対し $\varphi(n) = (\varphi_1 \circ \cdots \varphi_n)(n)$ として得られる φ が求めるものである．

命題 4.2　各 $m \in \mathbb{Z}_{>0}$ に対し $I_m \subset \mathbb{Z}_{>0}$ は可算無限集合で単調減少列であるとする．このとき狭義単調増加写像 $\varphi : \mathbb{Z}_{>0} \to \mathbb{Z}_{>0}$ が存在し，各 $m \in \mathbb{Z}_{>0}$ に対し $l \geq m$ ならば $\varphi(l) \in (\varphi_1 \circ \cdots \circ \varphi_m)(\mathbb{Z}_{>0})$ を満たす．

（証明）　$\varphi(1) = \min I_1$ とし $m \geq 2$ に対しては帰納的に $\varphi(m) = \min\{k \in I_m; k \geq \varphi(m-1)+1\}$ として得られる φ が求めるものである．

一つ，応用例を挙げよう．

定理 4.3　距離空間 (X, d) は全有界かつ完備ならば点列コンパクトである．

（証明）　$a = (a_n; n \in \mathbb{Z}_{>0})$ を X の点列とする．X は全有界であるから $\{B(x,1); x \in X\}$ は有限部分被覆を持つ（ここに $B(x;r) = \{y \in X; d(x,y) < r\}$）．有限部分被覆のうちの一つは a の部分列を含む．即ち $x_1 \in X$ が存在し，$I_1 = \{n \in \mathbb{Z}_{>0}; a_n \in B(x_1;1)\}$ は可算無限となる．以下，帰納的に各 $m \in \mathbb{Z}_{>0}$ に対し $x_m \in X$ が存在し，$I_m = \{n \in I_{m-1}; a_n \in B(x_m; 1/m)\}$ は可算無限となる．このとき $(I_m; m \in \mathbb{Z}_{>0})$ は単調減少列をなす．そこで，命題 4.2 の φ を取る．任意の $m \in \mathbb{Z}_{>0}$ に対し $k, l \geq m$ とすれば

$$d((a\circ\varphi)(k),(a\circ\varphi)(l)) \leq d((a\circ\varphi)(k),x_m)+d(x_m,(a\circ\varphi)(l)) \leq 2/m$$

となるので $((a\circ\varphi)(l); l\geq m)$ はコーシー列をなす．X の完備性より，これは a の収束部分列となる．

4.4 アスコリ・アルツェラの定理

この節では (X,d) をコンパクト距離空間とし Y をバナッハ空間とする．X から Y への連続写像全体のなすベクトル空間 $C(X;Y)$ は，一様ノルム $\|\cdot\|_\infty$ でバナッハ空間となる．この相対コンパクト部分集合の特徴付けを与えるのがアスコリ・アルツェラの定理である．

定理 4.4　バナッハ空間 $C(X;Y)$ の部分集合 $\mathscr{F}$ に対し次は同値である．

(1)　$\mathscr{F}$ は相対コンパクトである．

(2)　$\mathscr{F}$ は相対点列コンパクトである．

(3)　$\mathscr{F}$ は全有界である．

(4)　任意の $x\in X$ に対し $\mathscr{F}(x)\equiv\{f(x)\in Y; f\in\mathscr{F}\}$ は Y で相対コンパクトであり，$\mathscr{F}$ は X 上同等一様連続である．即ち $\lim_{\delta\downarrow 0}\sup_{f\in\mathscr{F}}\omega_\delta(f)=0$ が成立する．ここに $\omega_\delta(f)=\sup\{\|f(x)-f(y)\|_Y; x,y\in X, d(x,y)<\delta\}$ は f の δ の連続率（δ-modulus of continuity of f）である．

（証明）　**(1)**, **(2)**, **(3)** の同値性は良く知られているので，**(3)** と **(4)** との同値性のみを示そう．

(3) $\Longrightarrow$ **(4)**：$\mathscr{F}$ は全有界であるから任意の $\varepsilon>0$ に対し有限個の $f_1,\cdots,f_n\in\mathscr{F}$ が存在し $\mathscr{F}\subset\bigcup_{j=1}^n B(f_j;\varepsilon/3)$ とできる．ここに $B(f_j;\varepsilon/3)=\{f\in C(X;Y);\|f-f_j\|_\infty<\varepsilon/3\}$ とする．任意に $x\in X$ を取る．任意の $f\in\mathscr{F}$ に対し j が存在して $\|f-f_j\|_\infty<\varepsilon/3$ となる．これより

$$\mathscr{F}(x)=\{f(x)\in Y; f\in\mathscr{F}\}\subset\bigcup_{j=1}^n B_Y(f_j(x);\varepsilon/3)$$

が従う．これは $\mathscr{F}(x)$ は完備距離空間 Y で全有界即ち相対コンパクトであることを意味する．次に $\varepsilon>0, f_1,\cdots,f_n\in\mathscr{F}$ を上と同様に取る．各 f_j はコンパクト距離空間上連続であるから一様連続である．従って $\delta_j>0$ が存在し $d(x,y)<\delta_j$ なる任意の $x,y\in X$ に対し $\|f_j(x)-f_j(y)\|_Y<\varepsilon/3$ が成り立つ．そこで $\delta=\min_{1\leq j\leq n}\delta_j$ と置く．任意の $f\in\mathscr{F}$ に対し $f\in B(f_j;\varepsilon/3)$ なる j を取る．このとき $d(x,y)<\delta$ なる任意の $x,y\in X$ に対し

$$\begin{aligned}\|f(x)-f(y)\|_Y &\leq \|f(x)-f_j(x)\|_Y+\|f_j(x)-f_j(y)\|_Y+\|f_j(y)-f(y)\|_Y\\ &\leq 2\sup_{z\in X}\|f(z)-f_j(z)\|_Y+\|f_j(x)-f_j(y)\|_Y<\varepsilon\end{aligned}$$

が成り立つ．これは $\mathscr{F}$ が同等連続であることを意味する．

(4) $\Longrightarrow$ (3)：任意の $\varepsilon > 0$ に対し $\delta > 0$ が存在して $\sup_{f\in\mathscr{F}} \omega_\delta(f) < \varepsilon/4$ が成り立つ．$x \in X$ に対し $B_X(x;\delta) = \{y \in X; d(x,y) < \delta\}$ と置くと $\{B_X(x;\delta); x \in X\}$ は X の開被覆ゆえ有限部分被覆 $\{B_X(x_i;\delta); 1 \leq i \leq m\}$ を持つ．仮定より $K \equiv \bigcup_{i=1}^m \mathscr{F}(x_i)$ は相対コンパクトゆえ有限個の $\{y_j; 1 \leq j \leq n\} \subset Y$ があって $K \subset \bigcup_{j=1}^n B_Y(y_j;\varepsilon/4)$ が成り立つ．さて任意の $f \in \mathscr{F}$ と任意の $i \in \{1,\cdots,m\}$ に対し $f(x_i) \in K$ ゆえ $f(x_i) \in B_Y(y_j;\varepsilon/4)$ なる j を一つ取ることができる．こうして任意の $f \in \mathscr{F}$ に対し $\sigma : \{1,\cdots,n\} \to \{1,\cdots,m\}$ が存在し，各 i に対し $f(x_i) \in B_Y(y_{\sigma(i)};\varepsilon/4)$ とすることができる．$\{1,\cdots,n\}$ から $\{1,\cdots,m\}$ への写像全体のなす（有限）集合を $\mathfrak{S}_{n,m}$ と表すと

$$\mathscr{F} = \bigcup_{\sigma\in\mathfrak{S}_{n,m}} \mathscr{F}_\sigma,\ \mathscr{F}_\sigma = \{f \in \mathscr{F}; f(x_i) \in B_Y(y_{\sigma(i)};\varepsilon/4)\ \forall i\}$$

が成り立つ．そこで $\operatorname{diam} \mathscr{F}_\sigma = \sup_{f,g\in\mathscr{F}_\sigma} \sup_{x\in X} \|f(x) - g(x)\|_Y < \varepsilon$ であることを示せば充分である．

$f, g \in \mathscr{F}_\sigma$ と $x \in X$ を任意に与える．$x \in B_X(x_i;\delta)$ なる i を一つ取れば

$$\begin{aligned}
&\|f(x) - g(x)\|_Y \\
&\leq \|f(x) - f(x_j)\|_Y + \|f(x_i) - y_{\sigma(i)}\|_Y \\
&\quad + \|y_{\sigma(i)} - g(x_i)\|_Y + \|g(x_i) - g(x)\|_Y \\
&< \omega_\delta(f) + \varepsilon/2 + \omega_\delta(g) < \varepsilon
\end{aligned}$$

となるので $\operatorname{diam} \mathscr{F}_\sigma < \varepsilon$ が従う．これが示すべきことであった．

4.5 常微分方程式の初期値問題—点列コンパクト性に基づく解法—

定理 4.5　X をバナッハ空間とし $t_0 \in \mathbb{R}$ および $u_0 \in X$ を与える．$a, b > 0$ に対し $D = [t_0, t_0 + a] \times \overline{B(u_0;b)}$ と置く．写像 $f : D \to X$ は連続で $f(D)$ は X の相対点列コンパクト集合であるとし

$$M = \sup\{\|f(t,u)\|; (t,u) \in D\}$$

と置く．$I = [t_0, t_0 + T]$, $T = \min(a, b/M)$ とする．このとき $u \in C^1(I;X)$ が存在して $u(t_0) = u_0$ および任意の $t \in I$ に対して (4.1) を満たす．

（証明）　各 $n \geq 1$ に対し区間 $I = [t_0, t_0 + T]$ の分割 Δ_n を次のように定める：

$$\Delta_n : t_0 = \tau_0^n < \tau_1^n < \cdots < \tau_{N(n)}^n = t_0 + T,$$

$$|\Delta_n| \equiv \max\{\tau_j^n - \tau_{j-1}^n; 1 \leq j \leq N(n)\} \to 0\ (n \to \infty).$$

次に各 $n \geq 1$ に対し分割 Δ_n に付随した点列 $(u_j^n; 0 \leq j \leq N(n))$ を

$$u_0^n = u_0, \quad u_1^n = u_0^n + (\tau_1^n - \tau_0^n) f(\tau_0^n, u_0^n) = u_0 + (\tau_1^n - t_0) f(t_0, u_0),$$

以下帰納的に

$$u_{j+1}^n = u_j^n + (\tau_{j+1}^n - \tau_j^n) f(\tau_j^n, u_j^n), \quad j = 1, \cdots, N(n) - 1$$

と定める．このとき $0 \leq j \leq N(n)$ なる任意の j に対し $\|u_{j+1}^n - u_0\| \leq TM \leq b$，即ち $(\tau_j^n, u_j^n) \in D$ となる．さて，点列 $(u_j^n; 0 \leq j \leq N(n))$ を線分で繋いで折線 $u_n : I \to X$ を定める：

$$u_n(t) = \frac{\tau_{j+1}^n - t}{\tau_{j+1}^n - \tau_j^n} u_j^n + \frac{t - \tau_j^n}{\tau_{j+1}^n - \tau_j^n} u_{j+1}^n, \quad t \in [\tau_j^n, \tau_{j+1}^n], \quad j = 0, \cdots, N(n) - 1.$$

ここで右辺の u_{j+1}^n に u_j^n による定義を代入すると，次の等式が得られる：

$$u_n(t) = u_j^n + (t - \tau_j^n) f(\tau_j^n, u_j^n), \quad t \in [\tau_j^n, \tau_{j+1}^n], \quad j = 0, \cdots, N(n) - 1.$$

次に，近似解 $u_n \in C(I; X)$ は任意の $t, s \in I$ に対し次の不等式を満たすことを示そう（このとき，特に，任意の $t \in I$ に対し $(t, u_n(t)) \in D$ となる）.

$$\|u_n(t) - u_n(s)\| \leq M|t - s|.$$

$t > s$ の場合を示せば充分である．$0 \leq j \leq k \leq N(n) - 1$ なる j, k が存在し $t \in [\tau_k^n, \tau_{k+1}^n]$, $s \in [\tau_j^n, \tau_{j+1}^n]$ を満たす．このとき $j > k$ ならば

$$\begin{aligned} u_n(t) - u_n(s) = {} & (t - \tau_k^n) f(\tau_k^n, u_k^n) \\ & + \sum_{l=j+1}^{k-1} (\tau_{l+1}^n - \tau_l^n) f(\tau_l^n, u_l^n) + (\tau_{j+1}^n - s) f(\tau_j^n, u_j^n) \end{aligned}$$

となるので M の定義を用いて

$$\begin{aligned} \|u_n(t) - u_n(s)\| &\leq M((t - \tau_k^n) + \sum_{l=j+1}^{k-1} (\tau_{l+1}^n - \tau_l^n) + (\tau_{j+1}^n - s)) \\ &= M(t - s) \end{aligned}$$

を得る．ただし $j = k - 1$ の場合は和の記号の部分は 0 とみなす．$j = k$ ならば

$$\begin{aligned} u_n(t) - u_n(s) &= (t - \tau_k^n) f(\tau_k^n, u_k^n) - (s - \tau_k^n) f(\tau_k^n, u_k^n) \\ &= (t - s) f(\tau_k^n, u_k^n) \end{aligned}$$

より同じ不等式を得る．特に $s = t_0$ とすると $\|u_n(t) - u_0\| \leq M|t - t_0| \leq MT \leq b$ となるので $(t, u_n(t)) \in D$ が従う．

上の議論において $t \in [\tau_k^n, \tau_{k+1}^n]$, $s = t_0 \in [\tau_0^n, \tau_1^n]$ の場合を考えると $u_n(s) = u_n(t_0) = u_0$ であるから等式

$$u_n(t) - u_0 = (t - \tau_k^n) f(\tau_k^n, u_k^n) + \sum_{j=0}^{k-1} (\tau_{j+1}^n - \tau_j^n) f(\tau_j^n, u_j^n)$$

より $(u_n(t) - u_0)/(t - t_0)$ は $f(D)$ の凸包に属すことが分かる．$f(D)$ は相対点列コンパクトなので $f(D)$ の凸包もそうである．従って各 $t \in I$ に対し $((u_n(t) - u_0)/(t - t_0); n \in \mathbb{Z}_{>0})$ は収束部分列を持ち，ゆえに $(u_n(t); n \in \mathbb{Z}_{>0})$ も収束部分列を持つ．

以上より (u_n) は I 上同等一様連続で各点 $t \in I$ に対し $(u_n(t); n \in \mathbb{Z}_{>0})$ は

点列コンパクトであることが分かった．アスコリ・アルツェラの定理より，狭義単調増加写像 $\varphi : \mathbb{Z}_{>0} \to \mathbb{Z}_{>0}$ および $u \in C(I;X)$ が存在し $(u_{\varphi(n)}; n \in \mathbb{Z}_{>0})$ は u に $C(I;X)$ で収束する．特に $u(t_0) = u_0$ であり任意の $t, s \in I$ に対し u は不等式 $\|u(t) - u(s)\| \le M|t-s|$ を満たす．X の部分集合 $K = u(I) \cup \bigcup_{n=1}^{\infty} u_n(I)$ はコンパクトであるから $I \times K \ni (t,y) \mapsto f(t,y) \in X$ は一様連続となる．以下では簡単のために $(u_{\varphi(n)})$ を改めて (u_n) と表す．このとき $t \in [\tau_k^n, \tau_{k+1}^n]$ なる $0 \le k \le N(n) - 1$ に対し

$$
\begin{aligned}
u(t) - u_0 - \int_{t_0}^{t} f(t', u(t'))\, dt' = u(t) - u_n(t) \\
+ \int_{\tau_k^n}^{t} (f(\tau_k^n, u_n(\tau_k^n)) - f(t', u_n(t')))\, dt' \\
+ \sum_{j=0}^{k-1} \int_{\tau_j^n}^{\tau_{j+1}^n} (f(\tau_j^n, u_n(\tau_j^n)) - f(t', u_n(t')))\, dt' \\
+ \int_{t_0}^{t} (f(t', u_n(t')) - f(t', u(t')))\, dt'
\end{aligned}
$$

と表せば

$$
\begin{aligned}
&\|u(t) - u_0 - \int_{t_0}^{t} f(t', u(t'))\, dt'\| \\
&\le \|u(t) - u_n(t)\| + \sup_{|t'-t''| \le |\Delta_n|} \|f(t', u_n(t')) - f(t'', u_n(t''))\| \\
&\quad \times \sum_{j=0}^{k} (\tau_{j+1}^n - \tau_j^n) + \int_{t_0}^{t} \|f(t', u_n(t')) - f(t', u(t'))\|\, dt' \\
&\le \|u(t) - u_n(t)\| + \sup_{\substack{|t'-t''| \le |\Delta_n| \\ |y'-y''| \le M|\Delta_n|}} \|f(t', y') - f(t'', y'')\| \cdot T \\
&\quad + \int_{t_0}^{t} \|f(t', u_n(t')) - f(t', u(t'))\|\, dt' \to 0 \ \ (n \to \infty)
\end{aligned}
$$

が従う．ここに $f : I \times K \to X$ の一様連続性と有界収束定理を用いた．よって u は積分方程式の解となる．

註　定理 4.3 は弱点列コンパクトの場合にも成立する[4,6]．

参考文献

1) 新井朝雄，『物理現象の数学的諸原理』，共立出版，2003.
2) 増田久弥，『応用解析ハンドブック』，丸善出版，2010.
3) H. Hanche-Olsen, Diagonals without tears, 2013-09-07, http://www.math.ntnu.no/~hanche/notes/diagonal/diagonal.pdf
4) S. Kato, On existence and uniqueness conditions for nonlinear ordinary differential equations in Banach spaces, *Funkcialaj Ekvacioj* **19** (1976), 239–245.
5) R. Palais, A simple proof of the Banach contraction principle, *J. Fixed Point Theory Appl.* **2** (2007), 221–223.
6) A. Szép, Existence theorem for weak solutions of ordinary differetial equations in reflexive Banach spaces, *Studia Sci. Math. Hungar.* **6** (1971), 197–203.

（おざわ・とおる，早稲田大学理工学術院）

経路積分と量子解析

いかにして量子現象を数理的に扱うか

第4回

古典力学から量子力学へ(3)

非線形散逸系の変分原理と経路積分量子化

鈴木 増雄

4.1 はじめに

前回[1)]は，線形の散逸系の変分原理を与えるラグランジアンを発見法的に導出した．今回は，その結果を簡潔な表式に書き直し，物理的な解釈をし易くする．このような新しくわかり易い定式化を用いて，未解決の問題として残されていた "非線形散逸系の変分原理を与える散逸ラグランジアンの構成" という課題を肯定的に解説する．これらのラグランジアンを用いると，散逸系の経路積分量子化が可能となる．その定式化を用いて，散逸系の不確定性関係式を導くことができる．これらの議論には，経路に依存した散逸ラグランジアンの時間積分としての作用の変分をとるという新しい数学的手段が必要になる．この数理的な取扱いについても詳しく説明する．

4.2 線形散逸系における物理的ラグランジアンの簡潔な表式

散逸系のラグランジアンには，単に数学的なものから，エネルギー散逸（発熱）を表す物理的な表式までいろいろある．任意の正の数 τ と解析関数 $x(t)$ に対して，恒等式

$$\int_0^\tau \mathscr{L}_{\rm diss}^{\rm (math)}(t)dt = \int_0^\tau \mathscr{L}_{\rm diss}(t)dt \tag{4.1}$$

を満たせば，どの表式 $\mathscr{L}_{\rm diss}(t)$ も変分原理のラグランジアンになり得る[1)]．変関数 $x(t)$ に対する散逸的な運動方程式

$$m\ddot{x}(t) + \zeta\dot{x}(t) - F(x) = 0 \tag{4.2}$$

を変分原理で与えるラグランジアンは，前回ふれた通り[1)]，$\gamma = \frac{\zeta}{m}$ として

$$\mathscr{L}_{\rm diss}^{\rm (math)}(t) = {\rm e}^{\gamma(t-\tau)}\mathscr{L}_{\rm dyn}(t);\ \mathscr{L}_{\rm dyn}(t) = \frac{m}{2}\dot{x}(t)^2 - V(x(t)) \tag{4.3}$$

で与えられるが，これは数学的な表式に過ぎず，物理的なものとは言えない[1)]．このままでは，熱の発生と直接結びつかないからである．そこで，式 (4.1) を満たす（作用としては同じ値を与える）ような表式で，なおかつ熱の発生の効果

$$\zeta\int_0^t \dot{x}(s)^2 ds = (\text{粘性抵抗力}) \times (\text{距離})$$

を顕わに示すような物理的ラグランジアンをもう一度議論する．前回述べた物理的な散逸ラグランジアンの散逸項 $W_{\rm diss}(t) = \mathscr{L}_{\rm diss}(t) - \mathscr{L}_{\rm dyn}(t)$ は次のような多重積分の無限級数

$$W_{\rm diss}(t) = \sum_{n=1}^{\infty}\left(-\frac{\zeta}{m}\right)^n \int_0^t dt_1 \int_0^{t_1} dt_2 \cdots \int_0^{t_{n-1}} \mathscr{L}_{\rm dyn}(t_n)dt_n \tag{4.4}$$

で表され[1)]，第 1 項

$$W_{\rm diss}^{(1)}(t) = -\frac{\zeta}{2}\int_0^t \dot{x}(s)^2 ds + \gamma\int_0^t V(x(s))ds \tag{4.5}$$

以外の高次の項は扱いにくく，あまり実用的な表式でない．それらの高次の項は，第 1 項 $W_{\rm diss}^{(1)}(t)$ へのくり込みの効果を表すものと考えられるが[1)]，より物理的解釈のできる簡潔な表式が欲しい．実は，前回述べた通り，数学的ラグランジアンと物理的ラグランジアンを議論する際に，次の多重積分の変換公式が大きなヒントになった．

公式 4.1　任意の解析関数 $f(t)$ に対して次式が成り立つ：

$$\int_0^\tau dt \int_0^t dt_1 \cdots \int_0^{t_{n-1}} f(t_n)dt_n = \frac{1}{n!}\int_0^\tau (\tau - t)^n f(t)dt. \tag{4.6}$$

上の公式 4.1 をさらに一般化するには，次の公式が役に立つ．

公式 4.2　任意の 2 つの解析関数 $f(t)$ と $g(t)$ に対して次式が成り立つ：

$$\int_0^\tau g(\tau - t)f(t)dt = g(0)\int_0^\tau f(t)dt + \int_0^\tau dt \int_0^t g^{(1)}(t-s)f(s)ds. \tag{4.7}$$

これを証明するには，よく知られている方法であるが，両辺を τ で微分したものが等しいことを確めればよい（$\tau = 0$ に対して両辺が等しいことは明らかである）．この公式 4.2 を漸化的にくり返すと，次の公式が容易に導かれる．

公式 4.3　任意の自然数 n と任意の 2 つの解析関数 $f(t)$ と $g(t)$ に対して次式が成り立つ[2)]：

$$\begin{aligned}\int_0^\tau g(\tau - t)f(t)dt &= \int_0^\tau dt \int_0^t dt_1 \cdots \int_0^{t_{n-1}} g^{(n)}(t_{n-1} - t_n)f(t_n)dt_n \\ &\quad + \sum_{k=1}^{n-1} g^{(k)}(0)\int_0^\tau dt \int_0^t dt_1 \cdots \int_0^{t_{k-1}} f(t_k)dt_k. \end{aligned} \tag{4.8}$$

特に，$g(t) = t^n$ とおけば，式 (4.6) が得られる．この公式は後で有効に用いられる．さらに，次のように一般化することもできる[2]．

公式 4.4 任意の解析関数 $f(t,s)$ に対して次式が成り立つ：

$$\int_0^\tau f(\tau,t)dt = \int_0^\tau dt \int_0^t f_t(t,s)ds + \int_0^\tau f(t,t)dt. \tag{4.9}$$

ただし，$f_t(t,s)$ は $f(t,s)$ の t に関する偏微分を表す．

この公式は，2 変数関数 $f(t,s)$ の長方形の領域 $\{0 \leq t \leq \tau, 0 \leq s \leq \tau\}$ を 2 つの 3 角領域に分割した次の公式から容易に導かれる．

公式 4.5 任意の解析関数 $f(t,s)$ に対して次式が成り立つ：

$$\int_0^\tau dt \int_0^\tau f(t,s)ds = \int_0^\tau dt \int_0^t f(t,s)ds + \int_0^\tau dt \int_0^t f(s,t)ds. \tag{4.10}$$

ここまで一般化すると当り前の公式に見えてしまうが，公式 4.1～4.5 は大変有用な公式であり，後で有効に用いられる．

ついでながら，これらの公式（いやすべての公式）に共通な特徴は変数 t に時間のような次元を与えて考えると，両辺の次元が一致することである．このことは，物理分野の人にとっては自明のことであるが，数学の公式を捉えるときにも大変役に立つ．例えば，公式 4.1，すなわち式 (4.6) でみると，$(n+1)$ 重積分が 1 重積分に変換されているが，右辺の被積分関数の t の次元は，両辺共通の $f(t)$ の次元を除いて，$(n+1)$ 次元になっており，両辺の次元が一致していることがわかる．逆に，この自明な事実を用いると，式 (4.6) の $f(t)$ にかかる因子 $(\tau - t)^n$ の中が n であることが容易に思い出すことができ，便利である．次元を考えるということは，数式を幾何学的に捉えることにも通じる．例えば，物理でよく使われる定積分の公式

$$\int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{e}^{-x^2} dx = \sqrt{\pi} \tag{4.11}$$

には，π が入っている．これを幾何学的に解釈し，半径 R の円の面積 πR^2 または円周 $2\pi R$ と結びつければ，式 (4.11) の証明法がわかることになる．これもよく知られている通りである（すなわち，式 (4.11) の両辺を二乗して面積分に変換する）．

少し数学の公式に深入りしたが，これらの公式を準備すれば，我々の物理の問題の解決へのヒントが得られる．物理的な散逸ラグランジアン $\mathscr{L}_{\mathrm{diss}}^{(\mathrm{phys})}$ は，熱の発生と関係した式 (4.5) からも予想されるように，経路に依存した表式，すなわち時間 t の積分で表されると考えられる．そして，式 (4.1) に対応して，

$$\int_0^\tau \mathrm{e}^{-\gamma(\tau-t)} \mathscr{L}_{\mathrm{dyn}}(t)dt = \int_0^\tau \mathscr{L}_{\mathrm{diss}}^{(\mathrm{phys})}(t)dt \tag{4.12}$$

が成り立つはずである．公式 4.2 において $g(t) = \mathrm{e}^{-\gamma t}$ とおいた次の公式を用いることに気づくことが，今の問題を解くキーポイントの一つである．

公式 4.6　任意の解析関数 $f(t)$ に対して次式が成り立つ：

$$\int_0^\tau e^{-\gamma(\tau-t)} f(t)dt = \int_0^\tau f(t)dt - \gamma \int_0^\tau dt \int_0^t e^{-\gamma(t-s)} f(s)ds. \quad (4.13)$$

こうして，上の式 (4.13) で $f(t) = \mathscr{L}_{\mathrm{dyn}}(t)$ とおき，右辺の t 積分を一つにまとめて，式 (4.12) と比較すれば，次の簡潔な物理的ラグランジアンが求まる：

$$\mathscr{L}_{\mathrm{diss}}^{(\mathrm{phys})}(t) = \mathscr{L}_{\mathrm{dyn}}(t) - \gamma \int_0^t e^{-\gamma(t-s)} \mathscr{L}_{\mathrm{dyn}}(s)ds. \quad (4.14)$$

すなわち，散逸ラグランジアンの散逸項 $W_{\mathrm{diss}}(t)$ は

$$\begin{aligned} W_{\mathrm{diss}}(t) &\equiv \mathscr{L}_{\mathrm{diss}}^{(\mathrm{phys})}(t) - \mathscr{L}_{\mathrm{dyn}}(t) \\ &= -\frac{\zeta}{2} \int_0^t e^{-\gamma(t-s)} \dot{x}(s)^2 ds + \gamma \int_0^t e^{-\gamma(t-s)} V(x(s))ds \quad (4.15) \end{aligned}$$

と表される[2]．式 (4.15) の第 1 項が望み通り，熱の発生の効果を表しているが，散逸エネルギーそのもの（式 (4.5) の右辺第 1 項）ではなく，重みつき（コンボリューション，すなわち $\exp(-\gamma(\tau - t))$ の因子つき積分の形）になっているところが大変興味深い．定常状態の変分原理[3]では，それは重みなしの時間積分で表されるが，過渡現象の変分原理ではさらに重みまで現れることは注目すべきことである．オンサーガー・マクラップ[4]の変分理論では瞬間のエネルギー散逸を扱っているが，新理論では重みは遠い過去になるほど小さくなるが途中の過程まで考慮に入れたエネルギー散逸（エントロピー生成）を扱うところが本質的である．

さらに，興味深いことに，式 (4.14) の右辺の第 2 項の積分因子の指数関数 $\exp(-\gamma(t-s))$ をテーラー展開し，公式 4.1，すなわち式 (4.6) を用いると，前回くり込みの処法で導いた，多重積分の無限級数 (4.4) が直接導かれる．

こうして，線形系の散逸ダイナミクスに対する変分原理の問題は物理的にも見事に解決された．

4.3 非線形な散逸系における数学的ラグランジアンの導出

ここでは，さらに粘性係数 ζ が速度 $\dot{x}(t)$ に $\zeta = \zeta(\dot{x}(t))$ のように依存する非線形散逸系の変分原理[2]を説明する．すなわち，運動方程式

$$m\ddot{x}(t) + \zeta(\dot{x}(t))\dot{x}(t) - F(x(t)) = 0 \quad (4.16)$$

で記述される非線形散逸ダイナミクスを変分原理から導く．

ここではまず第一に，数学的な散逸ラグランジアンを探すことにする．これも長年の難問であるから，正攻法ではうまくいかない．すなわち，オイラー・ラグランジュ方程式

$$\ddot{x} f_{\dot{x}\dot{x}} + \dot{x} f_{\dot{x}x} + f_{\dot{x}t} - f_x = 0 \quad (4.17)$$

から運動方程式 (4.16) が得られるように，作用の被積分関数 $f(x(t), \dot{x}(t), t)$ を求めるという‘変分理論の逆問題’を解くことには，今までのところ誰も成功していない．そこで，ここでも発見法的に話を進める．前節で解説した線形系の数学的な散逸ラグランジアン (4.3) は，あえて積分を使って書くと

$$\mathscr{L}_{\mathrm{diss}}^{(\mathrm{math,linear})}(t;\tau) = \exp\left(\int_\tau^t \gamma ds\right)\mathscr{L}_{\mathrm{dyn}}(t) \tag{4.18}$$

となる．これを γ が $\gamma = \frac{1}{m}\zeta(\dot{x}(t)) \equiv \gamma(\dot{x}(t))$ のように，速度 $\dot{x}(t)$ に依存する場合に式 (4.18) を拡張する，もっともナイーヴな形は，$0 \le t \le \tau$ に対して

$$\mathscr{L}_{\mathrm{diss}}^{(\mathrm{trial})}(t;\tau) = \exp\left(\int_\tau^t \gamma(\dot{x}(s))ds\right)\mathscr{L}_{\mathrm{dyn}}(t) \tag{4.19}$$

であろう．一見，オイラー・ラグランジュ方程式 (4.17) の $f_{\dot{x}t}$ に相当する項から，式 (4.16) の散逸項 $\zeta(\dot{x}(t))\dot{x}(t)$ が出そうに見えるが，この議論は数学的に全く誤りである（これで「できた」と思った人は過去にもいるのではなかろうか．筆者もその一人である！）．式 (4.18) のように，ラグランジアンそのものが $x(t)$ の経路によるような汎関数で表されるような全く新しい変分理論[2)]では，オイラー・ラグランジュ方程式 (4.17) は使えない．式 (4.19) の積分の中の $\dot{x}(s)$ も $\dot{x}(s) + \delta\dot{x}(s)$ のように変化させて変分をとらなければならないからである．

そこで，オイラー・ラグランジュ方程式が使えるようにするため，変分をとる際に指数因子は時間微分だけで済むように，変関数 $x(t)$ ではなく，ある固定した関数 $\dot{x}_*(t)$ （後でうまく決める）を用いた積分を考え，非線形系 (4.16) の数学的な散逸ラグランジアンとして

$$\mathscr{L}_{\mathrm{diss}}^{(\mathrm{math})}(t;\tau) = \exp\left(\int_\tau^t \gamma(\dot{x}_*(s))ds\right)\mathscr{L}_{\mathrm{dyn}}(t) \tag{4.20}$$

を導入する[2)]．これは，$x_*(t)$ を後で適当に決める固定された関数とみなせば，$x(t), \dot{x}(t)$ および時間 t の通常の関数であるから，

$$作用\ I = \int_0^\tau \mathscr{L}_{\mathrm{diss}}^{(\mathrm{math})}(t;\tau)dt = 極値 \tag{4.21}$$

とするような変関数 $x(t)$ は，オイラー・ラグランジュ方程式 (4.17) より，零でない指数因子を除いて

$$m\ddot{x}(t) + \zeta(\dot{x}_*(t))\dot{x}(t) - F(x(t)) = 0 \tag{4.22}$$

という，$x(t)$ に関する，みかけ上（有効的に）線形の方程式をみたす．この方程式 (4.22) を解くと，その解には $\dot{x}_*(t)$ が含まれる．そこで，この段階で条件

$$x(t) = x_*(t),\ すなわち,\ \dot{x}(t) = \dot{x}_*(t) \tag{4.23}$$

をつけることにする．こうすると，この新変分原理から求めた解は，もとの方程式 (4.16) の解と一致し，同じ非線形な散逸ダイナミクスを記述することになる．

この非線形な散逸ダイナミクスの変分原理では，粘性係数 $\zeta(\dot{x}(t))$ すなわち

$\gamma(\dot{x}(t)) = \frac{1}{m}\zeta(\dot{x}(t))$ の中の $\dot{x}(t)$ は，変関数とみるのではなく，実際に起こる軌道 $x_*(t)$ の微分 $\dot{x}_*(t)$ の関数として捉えることが妥当であるという概念的な主張が提唱されている．次の節で求める，非線形な散逸系の物理的ラグランジアンにおいては，これは概念的に重要な意味を持つことを強調しておきたい．

4.4 一般の非線形系における物理的な散逸ラグランジアン

前節で求めた数学的な散逸ラグランジアンを基にして，熱の発生と直接係わるような，非線形系の物理的な散逸ラグランジアンを探してみよう．式 (4.20) を関係式 (4.1) に代入して，4.2 節で示した数学的な公式 4.4，すなわち式 (4.9) を用いると非線形系の物理的な散逸ラグランジアンは

$$\mathscr{L}_{\rm diss}^{\rm (phys)}(t) = \mathscr{L}_{\rm dyn}(t) - \int_0^t \gamma(\dot{x}_*(t'))\exp\left(\int_t^{t'} \gamma(\dot{x}_*(s))ds\right)\mathscr{L}_{\rm dyn}(t')dt' \tag{4.24}$$

で与えられることがわかる．この式の右辺の第 2 項は

$$\begin{aligned} W_{\rm diss}(t) &= -\frac{1}{2}\int_0^t \zeta(\dot{x}_*(t'))\dot{x}(t')^2\exp\left(\int_t^{t'} \gamma(\dot{x}_*(s))ds\right)dt' \\ &\quad + \int_0^t \gamma(\dot{x}_*(t'))\exp\left(\int_t^{t'} \gamma(\dot{x}_*(s))ds\right)V(x(t'))dt' \end{aligned} \tag{4.25}$$

と書き表せるから，式 (4.25) の右辺第 1 項が，線形系の場合と同様に，重みつきの熱の発生量を表しており，式 (4.24) は望み通り物理的であることがわかる．ただし，$\zeta(\dot{x}(t)) > 0$ の条件が必要である．この条件の下では，式 (4.24) と式 (4.25) の指数因子は，$t' < t$ の時間領域で

$$\exp\left(\int_t^{t'} \gamma(\dot{x}_*(s))ds\right) = \exp\left(-\frac{1}{m}\int_{t'}^t \zeta(\dot{x}_*(s))ds\right) < 1 \tag{4.26}$$

となり，しかも，熱の発生の時刻 t' が運動の時刻 t から遠くなるほど，変分への熱の発生の効き方が次式

$$\frac{1}{2}\exp\left(-\frac{1}{m}\int_{t'}^t \zeta(\dot{x}_*(s))ds\right)\zeta(\dot{x}_*(t'))\dot{x}(t')^2 \tag{4.27}$$

に比例して小さくなることに注意してほしい．さらに，この変分理論の特徴としては，粘性係数の時間依存性が真の運動 $x_*(t)$ で決まることである．もし，この粘性係数 ζ が変関数 $\dot{x}(t)$ そのもので変化するような変分関数すなわちラグランジアンを探し，たとえ見つかったとしても，それはあまりにも複雑であり物理的に解釈し難いものであろう．そういう変分関数は存在しないのかもしれない．少なくとも，比較的簡潔で物理的な散逸ラグランジアン (4.24) が見つかったことは大きな前進である．いずれにしても，以上のように非線形系の散逸ダイナミクスを変分原理で扱うことも可能となった．

4.5 多様な変分原理—より簡潔な物理的散逸ラグランジアン

すでに述べた通り，変分原理を与える変分関数は一意的ではなく，多様である．要は物理的に解釈し易いラグランジアンを見出すことである．式 (4.14) で与えた表式がもっとも簡潔な物理的ラグランジアンに見えるが，それを具体的に書き表すと，式 (4.15) のようになり，第 1 項は望み通り熱の発生を表しているものの，第 2 項が物理的に捉えにくい．そこで，この第 2 項をむしろ，式 (4.14) のポテンシャル項 $-V(x(t))$ とまとめてみることにする．再び，公式 4.6 を用いて導かれる次の公式に着目する：

$$\int_0^{\tau}\left(V(t)-\gamma\int_0^t \mathrm{e}^{-\gamma(t-s)}V(s)ds\right)dt=\int_0^{\tau}\mathrm{e}^{-\gamma(\tau-t)}V(t)dt. \tag{4.28}$$

ただし，$V(t)=V\left(x(t)\right)$ である．上の関係式に気づくと，次のような，より簡潔な物理的散逸ラグランジアン

$$\mathscr{L}_{\rm diss}^{\rm (phys)}(t;\tau)=\frac{m}{2}\dot{x}(t)^2-\mathrm{e}^{-\gamma(\tau-t)}V\left(x(t)\right)-\frac{\zeta}{2}\int_0^t \mathrm{e}^{-\gamma(t-s)}\dot{x}(s)^2ds \tag{4.29}$$

が見出される[2)]．式 (4.14) には，時間の区間 $0\le t\le\tau$ の端 τ は含まれていないが，式 (4.29) にはそれが含まれているのが特徴である．しかも，$t=\tau$ で式 (4.29) の第 2 項は $V\left(x(t)\right)$ そのものになり，第 1 項と合わせて通常の力学系のラグランジアンとなる．要するに，式 (4.29) の第 2 項は，散逸効果でくり込まれたポテンシャルと解釈でき，式 (4.29) は全体として物理的にもっともわかり易い散逸ラグランジアンであると言える[2)]．これは非線形系に拡張できる．

4.6 散逸ダイナミクスの経路積分量子化

散逸ダイナミクスのラグランジアン $\mathscr{L}_{\rm diss}(t)$ が求まったので，これを用いた経路積分

$$Z(\tau,0)=\int_{\rm ini}^{\rm fin}\exp\left[\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\int_0^{\tau}\mathscr{L}_{\rm diss}(t)dt\right]D[x(t)] \tag{4.30}$$

によって，この散逸系を量子化することができる．不確定性関係などの物理的な計算をする場合でも，$\mathscr{L}_{\rm diss}^{\rm (math)}(t)$ を用いると便利である．今までの多くの計算結果の問題点[5~10)]は因子 $\exp\left(-\frac{\zeta\tau}{m}\right)$ を考慮すると解決する[2)]．例えば，不確定性関係式は式 (4.3) を用いると，$\langle\Delta x\Delta p\rangle_t\ge\frac{\hbar}{2}\exp\left(-\frac{\zeta\tau}{m}\right)$ となり[2)]，右辺が $\frac{\hbar}{2}$ より小さくなり困難が生じるが，新しい理論では，$0\le t\le\tau$ という変分の時間領域内で，

$$\langle\Delta x\Delta p\rangle_t\ge\frac{\hbar}{2}\exp\left(\frac{\zeta}{m}(\tau-t)\right)\ge\frac{\hbar}{2} \tag{4.31}$$

となり，物理的な結果を与える[2)]．

非線形な散逸系 (4.16) を経路積分量子化する場合には，数学的ラグランジアン (4.20) を用いるのが便利である．なぜなら，関係式 (4.1) によって作用は同

じになるからである．ただし，粘性係数の時間依存性は真の運動 $x_*(t)$ の微分 $\dot{x}_*(t)$ で与えられるものとする．

4.7 おわりに

物理を変分原理で捉えることは物理法則やそれに基づく物理現象を概念的に深く理解するために極めて重要である[11, 12]．散逸系の変分原理が見つかったことにより，時間反転対称性を破る散逸系まで含めて，物理法則を変分原理により統一的に扱うことができるようになった．定常系の変分原理[3]でも瞬間のエントロピー生成ではなく時間積分された量が非線形では本質であることが筆者により指摘されたが，時間の矢が重要な意味を持つ不可逆現象の世界では，対象とする現象の起こる時刻に近いエネルギー散逸（発熱）ほど変分に大きく効く．これは不可逆現象を概念的に捉える際に深い示唆を与える．上に説明した散逸系の変分原理と散逸ラグランジアンはいろいろな応用が将来期待される．これらの散逸ラグランジアンを用いることにより，古典的な散逸系の経路積分量子化が可能となり，散逸効果をとり入れた不確定性関係式も導けることになった．

参考文献

1) 鈴木増雄，本連載第 3 回，「数理科学」2014 年 9 月号（サイエンス社）．
2) M. Suzuki, *Physica A*, submitted.
3) M. Suzuki, *Physica A* **392** (2013) 314, 4279.
4) L. Onsager and S. Machlup, *Phys. Rev.* **91** (1953) 1505.
5) 大貫義郎，岩波講座『力学』第 1 章（岩波書店，1994 年）．
6) 佐野雅巳，「力学的エネルギー」，「数理科学」2013 年 8 月号（サイエンス社）．
7) P. Caldirola, *Il Nuevo Cimento B* **77** (No.2) (1983) 241.
8) C.C. Gerry, *J. Math. Phys.* **25** (6) (1984) 1820. この論文では，変分原理よりも経路積分量子化に主眼がある．
9) H. Majima and A. Suzuki, *Ann. of Phys.* **326** (2011) 3000.
10) C-I. Um, K-H. Yeon and T.F. George, *Phys. Rep.* **362** (2002) 63.
11) 鈴木増雄，「物理学における変分原理——自然は無駄を嫌う」，「パリティ」2010 年 8 月号（丸善出版）．
12) 鈴木増雄，「変分原理と物理学」，「パリティ」2012 年 4 月号，2013 年 5 月号（丸善出版）．

（すずき・ますお，東京大学名誉教授）

特　集（2014 年 12 月号予告）

場と力の物理イメージ

局所性と非局所性からひもとく物理学の姿

巻頭言	米谷　民明
ニュートンの万有引力の法則	和田　純夫
マクスウェルの電磁気学	岡　真
アインシュタインの特殊相対性理論	小玉　英雄
アインシュタインの一般相対論	窪田　高弘
量子力学に現れる非局所性の意味	木村　元
場の量子論	川村　嘉春
大局的対称性と局所的対称性	谷井　義彰
弦理論における時空非局所性とは何か	米谷　民明
［コラム］	田中　正

特　集（2014 年 10 月号）

複素解析の視点

遍在する複素関数

複素解析の魔力	大沢　健夫
複素代数幾何学の美学	辻　元
複素数で表す極小曲面	宮岡　礼子
複素関数の微積分からリーマン面のモジュライ空間へ タイヒミュラー空間論への道すじ	藤川　英華
ブラウン運動と複素解析	厚地　淳
複素数とシュレディンガー方程式	中村　周
整数論における複素解析的方法	松本　耕二
多変数関数論における解析接続	神本　丈
［コラム］葉山シンポジウムの思い出 多変数複素解析の国際研究集会をめぐって	野口潤次郎
《連載》大学院入試問題からみた大学の数学　その 17	海老原　円 太田　雅人
微分方程式を考える　その 3	小澤　徹
《フィールズ賞で語る現代数学》第 2 回	渕野　昌

編集後記

幾何学的対象，例えば，私たちが暮らしている空間がどうなっているのかはとても気になることで，本特集でも取り上げられているグラフの話は大変興味深いところです．

さて，本号でそれぞれ 4 回目を迎えた連載のほうはいかがでしょうか．物理の新しい話題，微分方程式のより奥深い姿が見られることと思います．双方とも様々な計算や定理の証明が登場しますので，ぜひ手を動かしながらお読みいただければ幸いです．（R）

＊　　＊

今回は柔らかい幾何学ともいわれるトポロジーの応用面に着目し，特集しました．トポロジーの発想は数学や物理にとどまらず，化学や生物学にまで応用されています．今回取り上げたような様々な分野で応用されている背景には，トポロジーの持つ幾何学的な柔らかさだけでなく，その発想の柔軟さも寄与しているように思います．今後も思いもよらぬところで応用され得るかもしれません．これからも注目していきたいと思います．（T）

数　理　科　学　11月号

2014 年 11 月 1 日発行

数理科学編集部
TEL. (03) 5474–8816
FAX. (03) 5474–8817

発行人　木　下　敏　孝

ホームページ　http://www.saiensu.co.jp
ご意見・ご要望は　sk@saiensu.co.jp　まで．

発行所　© 株式会社 サイエンス社　TEL. (03) 5474–8500 (代表)
〒 151–0051 東京都渋谷区千駄ヶ谷 1–3–25　振替 00170–7–2387　(03) 5474–8600 (広告部)

印刷・製本　三美印刷株式会社　山岡景仁